

⑫ 公開特許公報(A)

平3-53380

⑮ Int. Cl.⁵G 06 F 15/40
C 07 B 61/00
G 06 F 15/42

識別記号

530 S
Z
M

庁内整理番号

7218-5B
7457-4H
7218-5B

⑬ 公開 平成3年(1991)3月7日

審査請求 未請求 請求項の数 8 (全28頁)

⑭ 発明の名称 化合物の対称性の処理方法

⑯ 特 願 平1-189982

⑰ 出 願 平1(1989)7月20日

⑱ 発 明 者 藤 田 真 作 神奈川県南足柄市中沼210番地 富士写真フイルム株式会
社内⑲ 出 願 人 富士写真フイルム株式 神奈川県南足柄市中沼210番地
会社

⑳ 代 理 人 弁理士 柳川 泰男

明 細 書

1. 発明の名称

化合物の対称性の処理方法

2. 特許請求の範囲

1. 化合物の構造に含まれる原子および/または原子団を、有限個の軌道に分割し、それぞれの軌道に剰余類表現からなる記号を付して処理することを特徴とする化合物の対称性の処理方法。

2. 上記化合物の構造を上記原子および/または原子団を表示するための三次元座標値；該原子および/または原子団の結合関係を示す整数値；を少なくとも含む結合表によって表わすことを特徴とする特許請求の範囲第1項記載の処理方法。

3. 上記剰余類表現が、点群とその部分群とからなる記号によって表わされることを特徴とする特許請求の範囲第1項記載の処理方法。

4. 化合物の構造に含まれる原子および/または原子団を同一の節点とみなした結果生じる骨格において、該節点を、有限個の軌道に分割したのち、それぞれの軌道に剰余類表現からなる記号を

付すこと；およびそれぞれの軌道を、上記原子および原子団を復元した構造に従ってさらに有限個の副軌道に分割したのち、それぞれの副軌道に剰余類表現からなる軌道を付すことを特徴とする化合物の対称性の処理方法。

5. 上記化合物の構造を上記原子および/または原子団を表示するための記号；節点の三次元座標値；節点間の結合関係を示す整数値；を少なくとも含む結合表によって表わすことを特徴とする特許請求の範囲第4項記載の処理方法。

6. 上記骨格の軌道に付した剰余類表現の記号が、点群と部分群とからなることを特徴とする特許請求の範囲第4項記載の処理方法。

7. 上記副軌道に付した剰余類表現の記号が、点群と部分群とからなることを特徴とする特許請求の範囲第4項記載の処理方法。

8. 化合物の構造に含まれる原子および/または原子団を同一の節点とみなした結果生じる骨格において、該節点を、有限個の軌道に分割すること；およびそれぞれの軌道を、上記原子および原

子団を復元した構造に従ってさらに有限個の副軌道に分割したのち、それぞれの副軌道の長さに応じて変数を与え、この変数の積からなる単位減縮巡回指標による符号を付すことを特徴とする化合物の対称性の処理方法。

3. 発明の詳細な説明

〔発明の分野〕

本発明は、化合物構造情報の処理方法に関するものであり、さらに詳しくは、化合物の対称性情報の処理方法に関するものである。

〔発明の技術的背景〕

近年において、コンピュータの発達に伴ない、化学物質、特に有機化合物の構造情報の記録方法についての各種の方法が提案され、利用されつつある。今日までに研究され、解明された有機化合物および有機化学反応は膨大の量にのぼるが、これらの既知の情報を有効に利用して公知の化学物質または化学反応を短時間のうちに検索したり、さらには所望の特性を有する新規物質の合成方法を見い出すことが望まれている。そのためには、

を明示していないという欠点がある。化学物質の対称性に関しては、これまで点群による分類がなされてきた。たとえば、V. Prelog, Science, 193巻17頁(1976)を参照されたい。点群によれば、水分子、フェナンスレン、ノルアダマントン、ノルボルナンなど一見してかなり相異した化合物が同じ C_{2v} (一般に、群の表記は C_{2v} のようにゴチック体で表記されるが、本明細書においては C_{2v} の如く、通常の文字で表記することでゴチック体の代用とする)点群に属するという不都合がある。このように点群による対称性の分類は、粗い分類であり、さらに詳細な分類法によって、化学物質の対称性の情報を処理する必要がある。

最近、詳細な分類を目指して、フレームワーク群(framework group)を用いる方法が提案された(J. A. Pople, J. Am. Chem. Soc., 102, 4615(1980))。

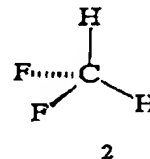
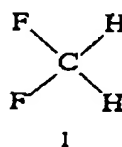
この方法によれば、点群では区別できない下記
の分子1および2(どちらも C_{2v} 点群に属する)
が、それぞれ $C_{2v}[C_2(C), \sigma_v(F_2H_2)]$

化学物質および化学反応の表現形態として、技術者にとってその構造的特徴を把握することが容易な従来の化学構造式の代りに、コンピュータが処理できる(すなわち、コンピュータが論理判断しうる)表現形態を開発し、利用することが要求されている。

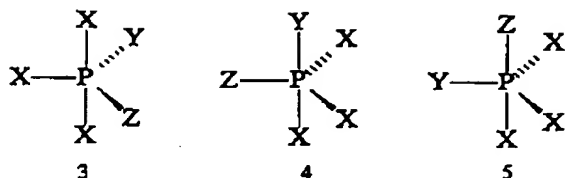
化学物質の記録方法としてはWLN(Wiswesser Linear Notation)などの線型表記法および結合表による方法が代表的なものであり、その詳細はたとえば、W. T. Wipke, S. R. Heller, R. J. Feldmann, E. Hyde(Eds): "Computer Representation and Manipulation of Chemical Information" (John Wiley and Sons, New York, 1974)に記載されている。結合表(connection table)は、たとえば化学物質の構造式における各原子の種類、それに結合する相手の原子および結合の種類などを一覧表にまとめたものであり、上記の線型表記法に比べて化学物質を原子単位で検索することができるとの利点がある。

これらの表現方法は、化学物質の対称性の情報

および $C_{2v}[C_2(C), \sigma_v(F_2), \sigma_v'(H_2)]$ というように区別できる。



しかしながら、ごく最近になって、下記の分子3, 4, 5は点群によっても、フレームワーク群によっても区別できないことが示された(J. Brocas, J. Am. Chem. Soc., 108, 1135(1986))。すなわちこれらは、すべて同じフレームワーク群 $C_2[\sigma(PXYS), X(X_2)]$ によって表現される。これらを区別するため、改良Schonflies記号を用いる方法が提案された。この方法によれば3は、 C_{2v} で表わされ、4および5は C_{2v} で表わされる。



しかしながら、この改良Schonflies記号を用いる方法によっても、なお4および5の相異は取扱うことができない。

【発明の要旨】

本発明は、化合物構造の対称性の情報を記録保存または表示記録するための新規な記号化および処理方法を提供することを目的とするものである。

また本発明は、化合物構造の対称性の情報をコンピュータ処理が可能な表現形態で記録保存するための処理方法を提供することである。

本発明を用いば、化合物の構造分類がより精密に行なわれるので、化合物構造の検索を効率よく行なうことができる。

すなわち、本発明は、

あるいは、別の目的には化合物の構造の定義として、原子および／または原子団を結合で結んだものとするところもある。第一の定義においては、該原子および／または原子団を表示するための記号；節点の三次元座標値；該原子および／または原子団の結合関係を示す整数値；を少なくとも含む結合表によって、化合物の構造が表わされる。第2の定義においては、該原子および／または原子団を表示するための三次元座標値；該原子および／または原子団の結合関係を示す整数値；を少なくとも含む結合表によって、化合物の構造が表わされる。

これ以降の説明においては、特に断らない限り第1の定義に従うが、当然第2の定義によっても多くの場合同一の結果が得られる。別の結果が得られるときのみ特記することにする。

上記の説明を補足するために、例をあげる。すなわち、上で述べた分子1は、下記の骨格8 (D_{3h} 点群) から誘導されたもの、分子2は下記の骨格7 (T_d 点群) から、分子3～5は下記の

(1) 化合物の 造に含まれる原子および／または原子団を、有限個の軌道に分割し、それぞれの軌道に剰余類表現からなる記号を付して処理することを特徴とする化合物の対称性の処理方法；

および

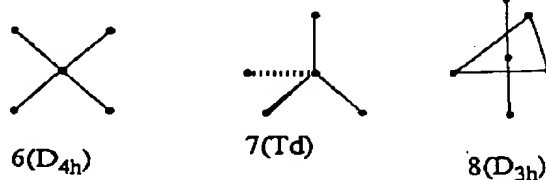
(2) 化合物の構造に含まれる原子および／または原子団を同一の節点とみなした結果生じる骨格において、該節点を、有限個の軌道に分割したのち、それぞれの軌道に剰余類表現からなる記号を付すこと；およびそれぞれの軌道を、上記原子および原子団を復元した構造に従ってさらに有限個の副軌道に分割したのち、それぞれの副軌道に剰余類表現からなる軌道を付すことを特徴とする化合物の対称性の処理方法；

を提供するものである。

【発明の構成】

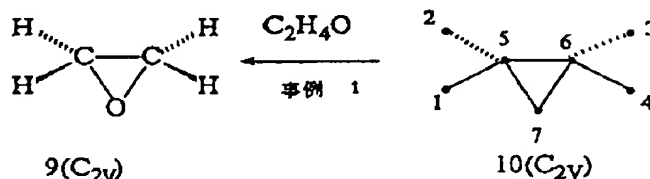
本発明においては、化合物の構造は、与えられた対称性をもつ骨格の各節点に、原子および／または原子団を置換させたものと定義する。この骨格は、含まれる節点を結合で結んだものである。

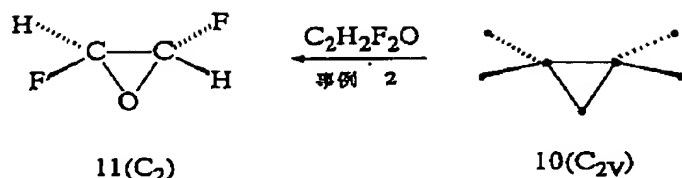
骨格8 (D_{3h} 点群) から誘導されたものと見なす。



まず、オキシラン分子(9)を考える。この分子は、骨格(10)をC, H, Oで置換したものと見なせる。この場合、骨格(10)とオキシラン(9)とは、同じ点群 C_{2v} に属する。換言すればC, H, Oによる置換によって、点群 C_{2v} は変わらない。(事例1)。

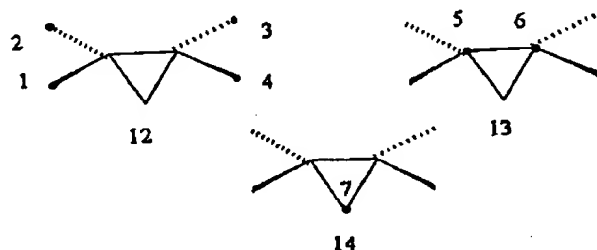
これに対して、化合物(11)の場合は、C, H, F, Oによる置換は、骨格の C_{2v} 点群から C_s 点群への変化を惹起する(事例2)、すなわち、化合物(11)は C_s 点群に属する。





この二つの場合を区別して、記号化してコンピュータで取扱うことが、効率のよい情報処理システムにとって重要である。

事例1と事例2とは、骨格(10)の節点の置換様式が異なる。ここで骨格(10)は、3種類の等価な節点をもつことに注意しよう。等価な節点の集合を、軌道(orbit)と呼ぶ。より正確に言えば、骨格(10)は、3種の軌道(12、13および14)をもつ。



の各軌道は次にのべる剰余類表現(coset representation)で表わされる。骨格の対称性を表わす群をGとする。Hを、Gの部分群とすると、群Gに含まれる要素は、次のような剰余類分解(coset decomposition)により分解される。

$$G = Hg_1 + Hg_2 + \dots + Hg_m \quad (1)$$

ただし、 g_j は恒等操作である。各 $g_j \in G$ ($j = 1, 2, \dots, m$)は代表元である。

各 Hg_j を一つの要素とした次の集合を考える。

$$\Gamma = \{Hg_1, Hg_2, \dots, Hg_m\} \quad (2)$$

Gに含まれるすべてのgについて、 Γ の各要素(各剰余類)にgを掛ける。このようにして、

$$\Gamma' = \{Hg_1g, Hg_2g, \dots, Hg_mg\} \quad (3)$$

を得る。 $\Gamma \rightarrow \Gamma'$ の変換は、次のような置換(permutation)に対応させることができる。

$$\pi_g = \begin{pmatrix} Hg_1 & Hg_2 & \dots & Hg_m \\ Hg_1g & Hg_2g & \dots & Hg_mg \end{pmatrix} \quad (4)$$

化合物9においては、軌道12の節点(●で示したもの)4個はすべて水素原子で満たされ、軌道13は2個の炭素原子により、軌道14は1個の酸素原子で満たされる。この充填は、骨格(10)と分子(9)の対称性がどちらも C_{2v} に属していることに対応している。一方、化合物11においては、軌道12は、水素2個、フッ素2個によって置換され、その結果対称性が C_{2v} から C_2 へ低下する。

上記の例から分かるように、一般にある骨格の節点を原子および/または原子団で置換する場合、この置換によって対称性が保持される場合(事例1)と低下する場合(事例2)に分かれる。コンピュータで、化合物分子の対称性を取扱う場合には、この両者を明確に表現する方法が必要である。本発明は両者のどちらにも適用できるような化合物構造の対称性情報の新規記号化法および処理方法に関するものである。

上述のように、骨格(およびそれから誘導された化合物構造)の節点は、軌道に分割される。こ

π_g ($\forall g \in G$)は、Gの表現となる。これをGのHによる剰余類表現(coset representation)という。本明細書では、これを次のように記号化する。

$$G(\nearrow H) = (\pi_g \mid \forall g \in G) \quad (5)$$

$G(\nearrow H)$ の次数(degree)mは、 $m = |G|/|H|$ で表わされる。明らかに $G(\nearrow H)$ は可移(transitive)である。すなわち $G(\nearrow H)$ は1個の軌道をもつ。

このようにして定義した剰余類表現(以後CRと略す)は、骨格の節点の軌道を記号化するための方法を考える。まず、Gの部分群のうち、共役する部分群ごとに一つずつ部分群を選んで次の集合をつくる。

$$SSG = \{G_1, G_2, \dots, G_s\} \quad (7)$$

ただし、順番は、各代表部分群の位数(order)の順であり、 G_1 は単位部分群(identity group) $G_s = G$ である。これらに対するCR共を集めて、次の集合を作る。

$$SCR = \{ G(\backslash G_1), G(\backslash G_2), \dots, G(\backslash G_s) \} \quad (8)$$

この集合は、Gの可移表現をすべて尽くしている。明らかに $G(\backslash G_1)$ は正則表現(regular representation)であり、 $G(\backslash G_s)$ は単位群に準同型(homomorphic)である。

次に有限群Gが

$$\Delta = \{ \delta_1, \delta_2, \dots, \delta_{|\Delta|} \} \quad (9)$$

に作用しているとしよう。このとき、この作用は、 Δ 上の置換表現 P_Δ で表わされるとする。

Δ は与えられた骨格の節点の集合とみなし、 P_Δ はその節点の対称性を表わしている。Gの作用により Δ は1個以上の軌道に分割される。この分割は次の命題によって表わされる。

(命題1)

P_Δ は次式により、いくつかの剰余類表現の和に直される。

$$P_\Delta = \sum_{i=1}^s \alpha_i G(\backslash G_i) \quad (10)$$

$$\alpha_i = \sum_{j=1}^s \mu_j m_j^{(i)} \quad (12)$$

ただし、 $i = 1, 2, \dots, s$ 。

ここで

不動点ベクトル

$$(\text{fixed-point vector:FPV}): (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_s) \quad (13)$$

および

多重度ベクトル

$$(\text{multiplicity vector:MV}): (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_s) \quad (14)$$

を定義する。

以下余白

このとき α_i は非負の整数である。この多重度 α_i ($i = 1, 2, \dots, s$) は次式により求められる。

$$\mu_j = \sum_{i=1}^s \mu_j m_j^{(i)} \quad (11)$$

($j = 1, 2, \dots, s$)。

ただし μ_j は、 P_Δ における G_j の示数(mark)である。また $m_j^{(i)}$ は $G(\backslash G_i)$ における G_j の示数である。この $m_j^{(i)}$ のすべてを行列として集めたものを、示数表(a table of marks)と呼ぶ。これに関しては、W. Burnside著「Theory of Groups Finite Order(2nd Ed.)」(Cambridge University Press Cambridge(1911))を参照されたい。また、W. Hässelbarth Theor. Chim. Acta, 67 339 (1985)、および C. A. Mead, J. Am. Chem. Soc. 109, 2130(1987)も参考になる。示数表の逆行列を、逆示数表4(the inverse of a table of marks)という。逆示数表の要素を $m_j^{(i)}$ で表わせば、式(11)は、次式に変換できる。

第1表

| C_{2v} | C_{2v}/C_1 | C_{2v}/C_2 | C_{2v}/C_2' | C_{2v}/C_2'' | C_{2v}/C_{2v} |
|-----------------|-----------------|--------------|---------------|----------------|-----------------|
| I | (1) (2) (3) (4) | (1) (2) | (1) (2) | (1) (2) | (1) |
| C_2 | (1) (2) (3) (4) | (1) (2) | (1) (2) | (1) (2) | (1) |
| $\sigma_{v(1)}$ | (1) (3) (2) (4) | (1) (2) | (1) (2) | (1) (2) | (1) |
| $\sigma_{v(2)}$ | (1) (4) (2) (3) | (1) (2) | (1) (2) | (1) (2) | (1) |

以下余白

第2表

| | C_1 | C_2 | C_3 | C_4 | C_{2v} |
|-------------------|-------|-------|-------|-------|----------|
| $C_{2v}/(C_1)$ | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| $C_{2v}/(C_2)$ | 2 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| $C_{2v}/(C_3)$ | 2 | 0 | 2 | 0 | 0 |
| $C_{2v}/(C_4)$ | 2 | 0 | 0 | 2 | 0 |
| $C_{2v}/(C_{2v})$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |

以下余白

第3表

| | $C_{2v}/(C_1)$ | $C_{2v}/(C_2)$ | $C_{2v}/(C_3)$ | $C_{2v}/(C_4)$ | $C_{2v}/(C_{2v})$ |
|-------|----------------|----------------|----------------|----------------|-------------------|
| C_1 | 1/4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| C_2 | -1/4 | 1/2 | 0 | 0 | 0 |
| C_3 | -1/4 | 0 | 1/2 | 0 | 0 |
| C_4 | -1/4 | 0 | 0 | 1/2 | 0 |
| C | 1/2 | -1/2 | -1/2 | -1/2 | 1 |

以下余白

第4表

| D_{2h} | $D_{2h}/(C_1)$ | $D_{2h}/(C_2)$ | $D_{2h}/(C_3)$ | $D_{2h}/(C_4)$ | $D_{2h}/(C_{2v})$ | $D_{2h}/(C_{2v})$ | $D_{2h}/(C_{2h})$ | $D_{2h}/(D_2)$ | $D_{2h}/(D_{2h})$ |
|------------------|---|------------------------------|------------------------------|------------------------------|-------------------|-------------------|-------------------|----------------|-------------------|
| I | (1) (2) (3) (4) (5) (6) - (7) (8) (9) (10) (11) (12) | (1) (2) (3) - (4) (5) (6) | (1) (2) (3) - (4) (5) (6) | (1) (2) (3) - (4) (5) (6) | (1) (2) (3) (4) | (1) (2) (3) | (1) (2) | (1) (2) | (1) |
| C_2 | (1 2 3) (4 5 6) (7 8 9) - (10 11 12) | (1 2 3) - (4 5 6) | (1 2 3) - (4 5 6) | (1 2 3) - (4 5 6) | (1) (2) (3) (4) | (1 2 3) | (1) (2) | (1) (2) | (1) |
| C_2^2 | (1 2 3) (4 5 6) (7 8 9) - (10 11 12) | (1 2 3) - (4 5 6) | (1 2 3) - (4 5 6) | (1 2 3) - (4 5 6) | (1) (2) (3) (4) | (1 2 3) | (1) (2) | (1) (2) | (1) |
| $C_{2(11)}$ | (1 4) (2 5) (3 6) (7 10) - (8 11) (9 12) | (1) (2 3) (4) - (5 6) | (1 4) (2 5) - (3 6) | (1 4) (2 5) - (3 6) | (1) (2) (3) (4) | (1) (2 3) | (1 2) | (1) (2) | (1) |
| $C_{2(12)}$ | (1 5) (2 6) (3 4) (7 11) - (8 12) (9 10) | (1 3) (2) - (4 5) (6) | (1 5) (2 6) - (3 4) | (1 5) (2 6) - (3 4) | (1) (2) (3) (4) | (1 3) (2) | (1 2) | (1) (2) | (1) |
| $C_{2(13)}$ | (1 6) (2 4) (3 5) (7 12) - (8 10) (9 11) | (1 2) (3) - (4 5) (6) | (1 6) (3 5) - (2 4) | (1 6) (2 4) - (3 5) | (1) (2) (3) (4) | (1 2) (3) | (1 2) | (1) (2) | (1) |
| σ_h | (1 7) (2 8) (3 9) (4 10) - (5 11) (6 12) | (1 4) (2 5) - (3 6) | (1 4) (2 6) - (3 5) | (1) (2) (3) - (4) (5) (6) | (1 3) (2 4) | (1) (2) (3) | (1 2) | (1) (2) | (1) |
| S_2 | (1 8 3 7 2 9) - (4 12 5 10 6 11) | (1 5 3 4 2 6) | (1 6 3 4 2 5) | (1 2 3) - (4 5 6) | (1 3) (2 4) | (1 2 3) | (1 2) | (1) (2) | (1) |
| S_2^5 | (1 9 2 7 3 8) - (4 11 6 10 5 12) | (1 6 2 4 3 5) | (1 5 2 4 3 6) | (1 2 3) - (4 5 6) | (1 3) (2 4) | (1 3 2) | (1 2) | (1) (2) | (1) |
| $\sigma_{v(11)}$ | (1 10) (2 11) (3 12) - (4 7) (5 8) (6 9) | (1 4) (2 6) - (3 5) | (1) (2 3) (4) - (5 6) | (1 4) (2 5) - (3 6) | (1) (4) (2 3) | (1) (2 3) | (1) (2) | (1 2) | (1) |
| $\sigma_{v(12)}$ | (1 11) (2 12) (3 10) - (4 9) (5 7) (6 8) | (1 6) (2 5) - (3 4) | (1 3) (2) - (4 5) (6) | (1 5) (2 6) - (3 4) | (1) (4) (2 3) | (1 3) (2) | (1) (2) | (1 2) | (1) |
| $\sigma_{v(13)}$ | (1 12) (2 10) (3 11) - (4 8) (5 9) (6 7) | (1 5) (2 4) - (3 6) | (1 2) (3) - (4 6) (5) | (1 6) (2 4) - (3 5) | (1) (4) (2 3) | (1 2) (2) | (1) (2) | (1 2) | (1) |

第5表

| | C_1 | C_2 | C_3 | C_4 | C_5 | C_{2v} | C_{3v} | C_{2h} | D_2 | D_{2h} |
|-------------------|-------|-------|-------|-------|-------|----------|----------|----------|-------|----------|
| $D_{2h}/(C_1)$ | 12 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| $D_{2h}/(C_2)$ | 6 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| $D_{2h}/(C_3)$ | 6 | 0 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| $D_{2h}/(C_4)$ | 8 | 0 | 0 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| $D_{2h}/(C_5)$ | 4 | 0 | 0 | 0 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| $D_{2h}/(C_{2v})$ | 3 | 1 | 1 | 3 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| $D_{2h}/(C_{3v})$ | 2 | 0 | 2 | 0 | 2 | 0 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| $D_{2h}/(C_{2h})$ | 2 | 0 | 0 | 2 | 2 | 0 | 0 | 2 | 0 | 0 |
| $D_{2h}/(D_2)$ | 2 | 2 | 0 | 0 | 2 | 0 | 0 | 0 | 2 | 0 |
| $D_{2h}/(D_{2h})$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |

以下余白

第6表

| | $/C_1$ | $/C_2$ | $/C_3$ | $/C_4$ | $/C_5$ | $/C_{2v}$ | $/C_{3v}$ | $/C_{2h}$ | $/D_2$ | $/D_{2h}$ |
|----------|--------|--------|--------|--------|--------|-----------|-----------|-----------|--------|-----------|
| C_1 | 1/12 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| C_2 | -1/4 | 1/2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| C_3 | -1/4 | 0 | 1/2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| C_4 | -1/12 | 0 | 0 | 1/6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| C_5 | -1/12 | 0 | 0 | 0 | 1/4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| C_{2v} | 1/2 | -1/2 | -1/2 | -1/2 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| C_{3v} | 1/4 | 0 | -1/2 | 0 | -1/4 | 0 | 1/2 | 0 | 0 | 0 |
| C_{2h} | 1/12 | 0 | 0 | -1/6 | -1/4 | 0 | 0 | 1/2 | 0 | 0 |
| D_2 | 1/4 | -1/2 | 0 | 0 | -1/4 | 0 | 0 | 0 | 1/2 | 0 |
| D_{2h} | -1/2 | 1/2 | 1/2 | 1/2 | 1/2 | -1 | -1/2 | -1/2 | -1/2 | 1 |

以下余白

第7表

| $I \setminus J$ | $T_d/(C_1)$ | $T_d/(C_2)$ | $T_d/(C_3)$ | $T_d/(C_4)$ | $T_d/(C_5)$ | $T_d/(S_4)$ | $T_d/(D_2)$ | $T_d/(C_{2v})$ | $T_d/(C_{3v})$ | $T_d/(D_{2d})$ | $T_d/(T)$ | $T_d/(T_d)$ | $\Sigma m_i^{(1)}$ |
|-----------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|----------------|----------------|----------------|-----------|-------------|--------------------|
| C_1 | 1/24 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1/24 |
| C_2 | -1/8 | 1/4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1/8 |
| C_3 | -1/4 | 0 | 1/2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1/4 |
| C_4 | -1/6 | 0 | 0 | 1/2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1/3 |
| S_4 | 0 | -1/4 | 0 | 0 | 1/2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1/4 |
| D_2 | 1/12 | -1/4 | 0 | 0 | 0 | 1/6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| C_{2v} | 1/4 | -1/4 | -1/2 | 0 | 0 | 0 | 1/2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| C_{3v} | 1/2 | 0 | -1 | -1/2 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| D_{2d} | 0 | 1/2 | 0 | 0 | -1/2 | -1/2 | -1/2 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| T | 1/6 | 0 | 0 | -1/2 | 0 | -1/6 | 0 | 0 | 0 | 1/2 | 0 | 0 | 0 |
| T_d | -1/2 | 0 | 1 | 1/2 | 0 | 1/2 | 0 | -1 | -1 | -1/2 | 1 | 0 | 0 |

第1表は C_{2v} 群の剰余類表現(CR)の具体的な形を示したものである。各要素は巡環(cycle)の積で示した。相当する示数表を第2表、逆示数表を第3表に示した。第4表～第6表は D_{3h} 群の各表である。第7表はTd群の逆示数表である。式10によって、 Δ は次の軌道に分割される。

$\Delta_{11}, \Delta_{12}, \dots, \Delta_{1\alpha_1}$ 、それぞれに

$G(\diagup G_1)$ が作用:

$\Delta_{21}, \Delta_{22}, \dots, \Delta_{2\alpha_2}$ 、それぞれに

$G(\diagup G_2)$ が作用:

および

$\Delta_{31}, \Delta_{32}, \dots, \Delta_{3\alpha_3}$ 、それぞれに

$G(\diagup G_3)$ が作用。

すなわち、 $G(\diagup G_i)$ なるCRは、 $\Delta_{i\alpha}$ なる軌道を支配する。ここで $G(\diagup G_i)$ は、 G と G_i とが決まれば一義的に(等価のものは一つとみて)決定される。明らかに、軌道の総数は

次の実施例で、上記の操作を詳述する。

以下余白

$$\sum_{i=1}^s \alpha_i \quad (16)$$

である。また式(14)により

$$|\Delta_{i\alpha}| = |G| / |G_i| \quad (17)$$

($i = 1, 2, \dots, \alpha_i$)

であるから、式10は次の関係式を与える。

$$|\Delta| = \sum_{i=1}^s \alpha_i \cdot |G| / |G_i| \quad (18)$$

上記の方法をもとに、本発明では、化合物の対称性を記号化するために次の方法を見出した。すなわち、事例1のような場合には、各軌道 $\Delta_{i\alpha}$ に含まれるすべての節点が r 個の同一原子または原子団 $A^{(i)}$ で置換される。ここでこの軌道は $G(\diagup G_i)$ に支配されるので、

$$r = |\Delta_{i\alpha}| = |G| / |G_i| \text{ である。}$$

これをコンピュータで取扱うために次のように記号化する。

$$G[\dots; \diagup G_i, (A^{(i)})^r; \dots] \quad (19)$$

[]内は式10に表われたCRの順番とする。これをSCR記号と呼ぶことにする。

(実施例1)

骨格10をもとにした化合物9を次のような結合表で表わす。

化合物9の結合表

| 節点番号 | 原子 | x | y | z | 隣接原子 (多重度) |
|------|----|-------|------|------|---------------------------|
| | | (相対値) | | | |
| 1 | H | 50 | -100 | 50 | 5(1) |
| 2 | H | -50 | -100 | 50 | 5(1) |
| 3 | H | -50 | 100 | 50 | 6(1) |
| 4 | H | 50 | 100 | 50 | 6(1) |
| 5 | C | 0 | -50 | 0 | 1(1), 2(1), 6(1), 7(1) |
| 6 | C | 0 | 50 | 0 | 3(1), 4(1), 5(1), 7(1) |
| 7 | O | 0 | 0 | -100 | 5(1), 6(1) |

この結合表で表わされる節点の置換表現を $P_{C_{2v}}$ とすると、その要素は、次の4個である。

$$I : (1)(2)(3)(4)(5)(6)(7).$$

$$C_2 : (13)(24)(56)(7).$$

$$\sigma_{v(1)} : (14)(23)(56)(7).$$

$$\sigma_{v(2)} : (12)(34)(5)(6)(7).$$

このデータから、 $P_{C_{2v}}$ の各部分群に対する示数は次のようになる。この示数は、各部分群に対する不動点の数に等しいことを利用して求めた。

$$\mu_{C_1} = 7, \mu_{C_2} = 1, \mu_{C_2'} = 1, \mu_{C_2''} = 3.$$

および

$$\mu_{C_{2v}} = 1, \text{よって } F P V = (71131)$$

FPVの要素は、

$$SSG = (C_1, C_2, C_2', C_2'', C_{2v})$$

の順に並べた。FPVを式12に代入すれば

$$M V = (71131) I M T = (10011) \quad (20)$$

となった(ただしIMTは第3表に示した逆示数表である)。これは、次式に相当する。

$$P_{C_{2v}} = C_{2v}(\angle C_1) + C_{2v}(\angle C_2') + C_{2v}(\angle C_{2v}), \quad (21)$$

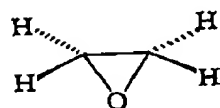
ただし、

$$S C R = (C_{2v}(\angle C_1), C_{2v}(\angle C_2), C_{2v}(\angle C_2'), C_{2v}(\angle C_{2v})).$$

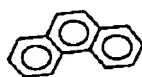
式20より、軌道12($\Delta_1 = (1, 2, 3, 4)$ とする)が $C_{2v}(\angle C_1)$ なるCRに属すること、軌道13($\Delta_2 = (5, 6)$)は $C_{2v}(\angle C_2')$ に属すること、軌道14($\Delta_3 = (1)$)は、 $C_{2v}(\angle C_{2v})$ に属することが示された。これをもとに、化合物9の対称性の情報を、 $C_{2v}[\angle C_1(H_4); \angle C_2'(C_2); \angle C_{2v}(O)]$ と記号化して、コンピュータに格納した。

同様の方法でフェナンスレン(15)、アイシアンジオン(16)、ノルアダマンタン(17)、ノルボルナン(18)、バスケタン(19)および水(20)の対称性を記号化し、コンピュ

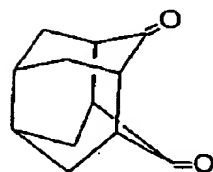
タに格納した(第8表)。



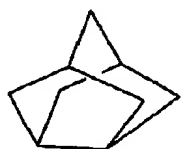
9



15



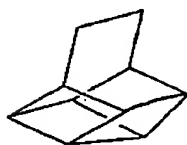
16



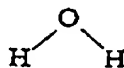
17



18



19



20

第8表

| 分子 | FPV | MV | SCR 表記法 |
|----|---------------|--------------|---|
| 9 | (7 1 1 3 1) | (1 0 0 1 1) | $C_{2v}[\angle C_1(H_4); \angle C_2'(C_2); \angle C_{2v}(O)]$ |
| 15 | (24 0 24 0 0) | (0 0 12 0 0) | $C_{2v}[\angle C_2(H_2); \angle C_2'(H_2)]$ |
| 16 | (28 0 8 0 0) | (5 0 4 0 0) | $C_{2v}[\angle C_1(C_2, 2H_2); \angle C_2'(C_2, 2H_2, O_2)]$ |
| 17 | (23 1 7 5 1) | (3 0 3 2 1) | $C_{2v}[\angle C_1(C_2, 2H_2); \angle C_2'(C_2, 2H_2); \angle C_{2v}(O)]$ |
| 18 | (19 1 5 3 1) | (3 0 2 1 1) | $C_{2v}[\angle C_1(C_2, 2H_2); \angle C_2'(C_2, 2H_2); \angle C_{2v}(O)]$ |
| 19 | (22 0 10 0 0) | (3 0 5 0 0) | $C_{2v}[\angle C_1(C_2, 2H_2); \angle C_2'(C_2, 2H_2)]$ |
| 20 | (3 1 3 1 1) | (0 0 1 0 1) | $C_{2v}[\angle C_1(H_2); \angle C_{2v}(O)]$ |

*SSG = $(C_1, C_2, C_2', C_2'', C_{2v}) \sim C_{2v}$

(実施例2)

骨格8は D_{3h} 対称であり、そのSSGは次のとおりであった。

$$SSG = \{C_1, C_2, C_3, C_3', C_3, C_{2v}, C_{3v}, C_{3h}, D_2, D_{3h}\}.$$

この骨格に対するFPVは、次のとおりであった。

$$FPV = (6\ 2\ 4\ 4\ 3\ 2\ 3\ 1\ 1\ 1).$$

式(12)により次の結果を得た。

$$(6\ 2\ 4\ 4\ 3\ 2\ 3\ 1\ 1\ 1) \text{IMT} = (0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 1\ 1\ 0\ 0\ 1). \quad (22)$$

ただしIMTは第6表の逆示数表である。式22の右辺のベクトルは次式に対応することがわかった。

$$P_{D_{3h}} = D_{3h}(\text{---}/C_{2v}) + D_{3h}(\text{---}/C_{3v}) + D_{3h}(\text{---}/D_{3h}). \quad (23)$$

なぜならば、

$$SCR = (D_{3h}(\text{---}/C_1), D_{3h}(\text{---}/C_2), D_{3h}(\text{---}/C_3), D_{3h}(\text{---}/C_3'), D_{3h}(\text{---}/C_3), D_{3h}(\text{---}/C_2v), D_{3h}(\text{---}/C_{2v}'), D_{3h}(\text{---}/C_{3h})).$$

$$D_{3h}(\text{---}/C_3), D_{3h}(\text{---}/C_{2v}), D_{3h}(\text{---}/C_{3v}), D_{3h}(\text{---}/C_{3h}), D_{3h}(\text{---}/D_2), D_{3h}(\text{---}/D_{3h})$$

式(23)は、骨格8が次の3個の軌道をもつことを示した。

$$\Delta_1 = \{1, 2, 3\} \text{ ただし } D_{3h}(C_{2v}) \text{ 支配}$$

$$\Delta_2 = \{4, 5\} \text{ ただし } D_{3h}(C_{3v}) \text{ 支配}$$

および

$$\Delta_3 = \{6\} \text{ ただし } D_{3h}(D_{3h}) \text{ 支配}$$

化合物21は、この骨格に PX_3Y_3 が置換したものと考えられるので、次の記号で示されることがわかった。

$$D_{3h}[\text{---}/C_{2v}(X_3); \text{---}/C_{3v}(Y_3); \text{---}/D_{3h}(P)]$$

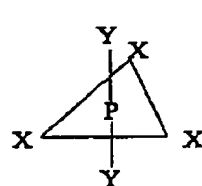
この記号は Δ_1 を X_3 で Δ_2 を Y_3 で Δ_3 を P で充填することを意味する。この記号を21の結合表とともにコンピュータに格納した。

その他の化合物22~28についても同様に対応する記号化を行ない、得られた記号をコンピュータに格納した。結果を第9表に示す。

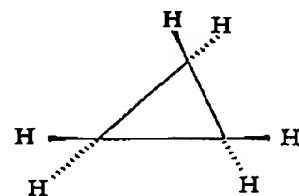
第9表

| 分子 | FPV | MV | SCR 表記法 |
|----|--------------------------|-----------------------|--|
| 21 | (5 2 4 4 3 2 3 1 1 1) | (0 0 0 0 0 1 1 0 0 1) | $D_{3h}[\text{---}/C_{2v}(X_3); \text{---}/C_{3v}(Y_3); \text{---}/D_{3h}(P)]$ |
| 22 | (9 1 3 3 0 1 0 0 0 0) | (0 0 1 0 0 1 0 0 0 0) | $D_{3h}[\text{---}/C_2(H_2); \text{---}/C_{3v}(C_3)]$ |
| 23 | (9 1 1 9 0 1 0 0 0 0) | (0 0 0 1 0 1 0 0 0 0) | $D_{3h}[\text{---}/C_2'(H_2); \text{---}/C_{3v}(C_3)]$ |
| 24 | (9 3 3 9 0 3 0 0 0 0) | (0 0 0 0 0 3 0 0 0 0) | $D_{3h}[\text{---}/C_{2v}(C_2, 2H_2)]$ |
| 25 | (12 0 4 0 0 0 0 0 0 0) | (0 0 2 0 0 0 0 0 0 0) | $D_{3h}[\text{---}/C_2(C_2, H_2)]$ |
| 26 | (34 0 14 0 10 4 0 0 0 0) | (0 0 5 0 0 0 2 0 0 0) | $D_{3h}[\text{---}/C_2(3C_2, 2H_2); \text{---}/C_{3v}(C_3, H_3)]$ |
| 27 | (24 0 0 12 0 0 0 0 0 0) | (1 0 0 2 0 0 0 0 0 0) | $D_{3h}[\text{---}/C_1(H_2); \text{---}/C_2'(2C_2)]$ |
| 28 | (4 2 2 4 1 3 1 1 1 1) | (0 0 0 0 0 1 0 0 0 1) | $D_{3h}[\text{---}/C_{3v}(F_3); \text{---}/D_{3h}(B)]$ |

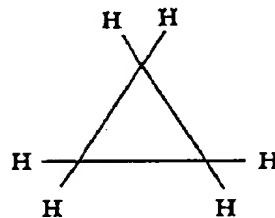
$$SSG = \{C_1, C_2, C_3, C_3', C_2, C_3, C_{2v}, C_{3v}, C_{3h}, D_2, D_{3h}\} \sim D_{3h}$$



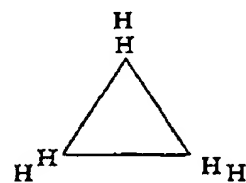
21



22



23



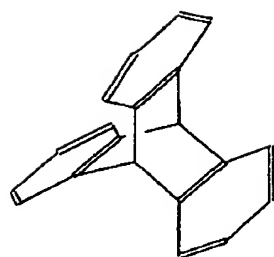
24



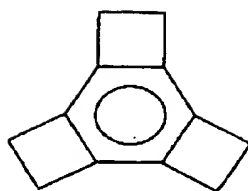
25

(実施例3)

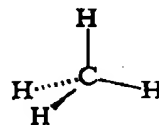
実施例1と同様にして、 T_d 点群に属する下記の化合物の構造29、30、31を記号化してコンピュータに格納した。第10表に結果を示す。



26



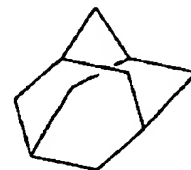
27



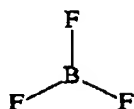
29



30



31



28

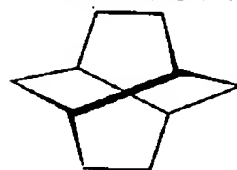
第10表

| 分子 | FPV | MV | SCR 表記法 |
|----|----------------|---------------|--|
| 29 | (5132111211) | (00000001001) | $T_d[C_{3v}(H_4):T_d(G)]$ |
| 30 | (80420002000) | (00000002000) | $T_d[C_{3v}(C_4,H_4)]$ |
| 31 | (282820022000) | (00100012000) | $T_d[C_2(H_{12}):C_{3v}(C_4):2/C_{3v}(C_4,H_4)]$ |

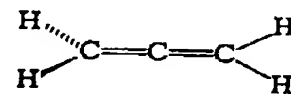
*SSG = $(C_1, C_2, C_3, S_4, D_2, C_{3v}, C_{2v}, D_{2d}, T, T_d) \sim T_d$

(実施例4)

実施例1と同様にして、 D_2 点群の化合物32、 D_{2d} 点群の33、34、35および D_{3h} 点群の36を記号化し、コンピュータに格納した。第11表に結果を示す。



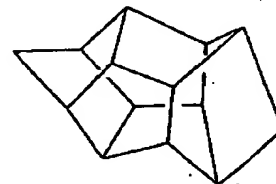
32



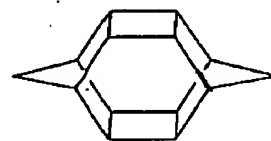
33



34



35



36

第11表

| 分子 | FPV | MV | SCR 表記法 |
|----|----------------------|--------------------|--|
| 32 | (250020) | (50910) | $D_4[5/C_1(2E, 4E); 7C_2'(C_2)]$ |
| 33 | (7315131D) | (0001010D) | $D_4[7/C_1(4E); 7C_2(C_2); 7C_2'(C_2)]$ |
| 34 | (131111111) | (1001000D) | $D_4[7/C_1(4E); 7C_2(C_2); 7C_2'(C_2)]$ |
| 35 | (392080200) | (20030100) | $D_4[2/C_1(C_2, 4E); 3C_2(C_2, 2E); 7C_2'(C_2)]$ |
| 36 | (30200106 002000) | (200021 001000) | $D_4[2/C_1(C_2, 4E); 2C_2(C_2, 4E);7C_2'(4E); 7C_2'(C_2)]$ |

D_4 については、 $SSG = (C_1, C_2, C_2', C_2'', D_2)$ 、 D_4 については、 $SSG = (C_1, C_2, C_2', C_2'', S_4, C_4, C_4', C_4'', D_2, D_4)$ 、 D_4 については、 $SSG = (C_1, C_2, C_2', C_2'', C_4, C_4', C_4'', C_4''', C_4'''' , C_4''''', C_4''''', C_4''''', D_2, D_4)$ 。

第8表の縮小参照

呼ぶ。このようにして得られた減縮表現を次の記号で表わす。

$$G(\diagup G_1) \downarrow G_2 = \{G(\diagup G_1)_g \mid g \in G_2\} \quad (24)$$

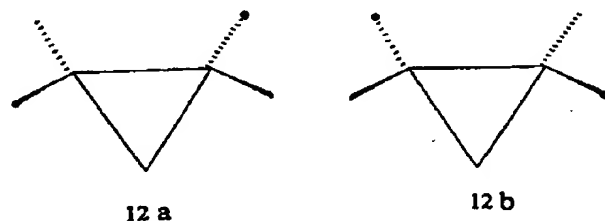
CRは可移(transitive)なのに対し、式24の減縮表現(SR)は非可移(intransitive)である。したがって、式24のSRは、 G_2 の部分群 H_k (これは G_2 に依存するが、簡単のためあらわには示さない)による剰余類表現の和として表わされる。 G_2 の部分群について、上記式(7)(8)と同様に、

$$SSG = \{H_1, H_2, \dots, H_v\} \quad (25)$$

$$SCR = \{G_2(\diagup H_1), G_2(\diagup H_2), \dots, G_2(\diagup H_v)\} \quad (26)$$

を定義する。命題1は次の命題に変換される。
(命題1-1) 減縮表現 $G(\diagup G_1) \downarrow G_2$ は、次式に示すとおり、可移な剰余類表現に分解される。

事例2の化合物構造の対称性の情報を記号化するためには、剰余類表現(CR)の減縮(subduction)を行なう必要がある。化合物11にたちかえて考察してみよう。この場合、骨格10の軌道12は、 C_{2v} から C_1 へ対称性が低下するのに伴って、2つの副軌道(12aおよび12b)に分割される。これらの副軌道のそれぞれに、 H_2 および F_2 が置換すれば、化合物11の構造になる。



この例を記号化するために、CRの減縮(subduction)を行なう。すなわち、 $G(\diagup G_1)$ なるCRの部分群 G_2 に相当する要素を取出す。この取出した要素を減縮表現(subduced representation)と呼び、この取出す操作を減縮(subduction)と

$$G(\diagup G_1) \downarrow G_2 = \sum_{k=1}^v \beta_k^{(1)} G_2(\diagup H_k) \quad (27)$$

ただし $i = 1, 2, \dots, s$ および
 $j = 1, 2, \dots, s$ 。

ただし $\beta_k^{(1)}$ は、非負の整数である。これら多重度 $\beta_k^{(1)}$ は、次式によって求められる。

$$\nu_i = \sum_{k=1}^v \beta_k^{(1)} m_i^{(k)} \quad (28)$$

$i = 1, 2, 3, \dots, v$ 。

ただし、 ν_i は H_i の $G(\diagup G_1) \downarrow G_2$ における示数である。

ここで、減縮ベクトル(subduction vector)を、次の式で定義する。

$$SV = (\beta_1^{(1)}, \beta_2^{(1)}, \dots, \beta_v^{(1)}) \quad (29)$$

$G(\diagup G_1)$ は一定の置換群として求められる。したがって、SVは G_1 と G_2 が定まれば一定となる。式(27)の関係を表にしたものを減縮表と呼ぶことにする。次の実施例は減縮表を得る手段を示したものである。

(実施例5)

第1表に示す値から、 $C_{2v}(\nearrow C_1) \downarrow C_2$ に属する要素を取出すと(1)(2)(3)(4)および(14)(23)である。したがって、次の示数を得た。

$$\nu_{C_1} = 4 \quad \text{および} \quad \nu_{C_2} = 0$$

これからFVP = (4 0)を得た。

C_2 に対する示数表(MT)および逆示数表は次のとおりである。

$$MT = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad IMT = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ -1/2 & 1 \end{bmatrix},$$

これから

$$MV = (4 \quad 0) \quad IMT = (2 \quad 0)$$

を得た。このベクトル(2 0)は、次式に対応する。

$$C_{2v}(\nearrow C_1) \downarrow C_2 = 2C_2(\nearrow C_1). \quad (30)$$

同様に、 C_{2v} のすべてのCRについて減縮を行ない、式30に相当する式を得た。これらをまとめて、減縮表として第12表を得た。

第12表

| $i \setminus j$ | $\downarrow C_1$ | $\downarrow C_2$ | $\downarrow C_2'$ | $\downarrow C_1'$ | $\downarrow C_{2v}$ |
|---------------------------|----------------------|----------------------|------------------------|------------------------|---------------------------|
| $C_{2v}(\nearrow C_1)$ | $4C_1(\nearrow C_1)$ | $2C_2(\nearrow C_1)$ | $2C_2'(\nearrow C_1)$ | $2C_2(\nearrow C_1)$ | $C_{2v}(\nearrow C_1)$ |
| $C_{2v}(\nearrow C_2)$ | $2C_1(\nearrow C_1)$ | $2C_2(\nearrow C_2)$ | $C_2'(\nearrow C_1)$ | $C_2'(\nearrow C_2)$ | $C_{2v}(\nearrow C_2)$ |
| $C_{2v}(\nearrow C_2')$ | $2C_1(\nearrow C_1)$ | $C_2(\nearrow C_1)$ | $2C_2'(\nearrow C_2')$ | $C_2'(\nearrow C_2')$ | $C_{2v}(\nearrow C_2')$ |
| $C_{2v}(\nearrow C_1')$ | $2C_1(\nearrow C_1)$ | $C_2(\nearrow C_1)$ | $C_2(\nearrow C_2)$ | $2C_2'(\nearrow C_2')$ | $C_{2v}(\nearrow C_1')$ |
| $C_{2v}(\nearrow C_{2v})$ | $C_1(\nearrow C_1)$ | $C_2(\nearrow C_2)$ | $C_2'(\nearrow C_2')$ | $C_2(\nearrow C_2)$ | $C_{2v}(\nearrow C_{2v})$ |

(実施例6)

実施例5と同様にして D_{2h} 群の減縮表を得た。結果を第13表に示す。

以下余白

第13表

| $i \setminus j$ | $\downarrow C_1$ | $\downarrow C_2$ | $\downarrow C_3$ | $\downarrow C_4$ | $\downarrow C_5$ | $\downarrow C_{2v}$ | $\downarrow C_{2v}$ | $\downarrow C_{2h}$ | $\downarrow D_2$ | $\downarrow D_{2h}$ |
|-----------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|---------------------|---------------------|---------------------|------------------|---------------------|
| D_{2h}/C_1 | $12C_1/C_1$ | $6C_2/C_1$ | $6C_3/C_1$ | $6C_4/C_1$ | $4C_5/C_1$ | $3C_{2v}/C_1$ | $2C_{2v}/C_1$ | $2C_{2h}/C_1$ | $2D_2/C_1$ | D_{2h}/C_1 |
| D_{2h}/C_2 | $6C_1/C_2$ | $2C_2/C_2$ | $3C_3/C_2$ | $6C_4/C_2$ | $2C_5/C_2$ | C_{2v}/C_2 | C_{2v}/C_2 | C_{2h}/C_2 | $2D_2/C_2$ | D_{2h}/C_2 |
| | | $+2C_3/C_2$ | | | | $+C_{2v}/C_2$ | | | | |
| D_{2h}/C_3 | $6C_1/C_3$ | $3C_2/C_3$ | $2C_3/C_3$ | $3C_4/C_3$ | $2C_5/C_3$ | C_{2v}/C_3 | $2C_{2v}/C_3$ | C_{2h}/C_3 | D_2/C_3 | D_{2h}/C_3 |
| | | | $+2C_4/C_3$ | | | $+C_{2v}/C_3$ | | | | |
| D_{2h}/C_4 | $6C_1/C_4$ | $3C_2/C_4$ | $3C_3/C_4$ | $6C_4/C_4$ | $2C_5/C_4$ | $3C_{2v}/C_4$ | C_{2v}/C_4 | $2C_{2h}/C_4$ | D_2/C_4 | D_{2h}/C_4 |
| D_{2h}/C_5 | $4C_1/C_5$ | $2C_2/C_5$ | $2C_3/C_5$ | $2C_4/C_5$ | $4C_5/C_5$ | C_{2v}/C_5 | $2C_{2v}/C_5$ | $2C_{2h}/C_5$ | $2D_2/C_5$ | D_{2h}/C_5 |
| D_{2h}/C_{2v} | $3C_1/C_{2v}$ | C_2/C_{2v} | C_3/C_{2v} | $3C_4/C_{2v}$ | C_5/C_{2v} | C_{2v}/C_{2v} | C_{2v}/C_{2v} | C_{2h}/C_{2v} | D_2/C_{2v} | D_{2h}/C_{2v} |
| | | $+C_3/C_{2v}$ | $+C_4/C_{2v}$ | | | $+C_{2v}/C_{2v}$ | | | | |
| D_{2h}/C_{2h} | $2C_1/C_{2h}$ | C_2/C_{2h} | $2C_3/C_{2h}$ | C_4/C_{2h} | $2C_5/C_{2h}$ | C_{2v}/C_{2h} | $2C_{2v}/C_{2h}$ | C_{2h}/C_{2h} | D_2/C_{2h} | D_{2h}/C_{2h} |
| D_{2h}/C_{2v} | $2C_1/C_{2v}$ | C_2/C_{2v} | C_3/C_{2v} | $2C_4/C_{2v}$ | $2C_5/C_{2v}$ | C_{2v}/C_{2v} | C_{2v}/C_{2v} | $2C_{2h}/C_{2v}$ | D_2/C_{2v} | D_{2h}/C_{2v} |
| D_{2h}/D_2 | $2C_1/C_{2v}$ | $2C_2/C_{2v}$ | C_3/C_{2v} | C_4/C_{2v} | $2C_5/C_{2v}$ | C_{2v}/C_{2v} | C_{2v}/C_{2v} | C_{2h}/C_{2v} | $2D_2/C_{2v}$ | D_{2h}/D_2 |
| D_{2h}/D_{2h} | C_1/C_{2v} | C_2/C_{2v} | C_3/C_{2v} | C_4/C_{2v} | C_5/C_{2v} | C_{2v}/C_{2v} | C_{2v}/C_{2v} | C_{2h}/C_{2v} | D_2/D_{2h} | D_{2h}/D_{2h} |

【実施例7】

実施例5と同様にして、 D_2 群の減縮表を得た。結果を第14表に示す。

以下余白

第14表

| $i \setminus j$ | $\downarrow C_1$ | $\downarrow C_2$ | $\downarrow C_3$ | $\downarrow C_4$ | $\downarrow S_4$ | $\downarrow D_2$ | $\downarrow C_{2v}$ | $\downarrow C_{2v}$ | $\downarrow D_{2d}$ | $\downarrow T$ | $\downarrow T_d$ |
|-----------------|------------------|-----------------------------|----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|----------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|------------------------------------|----------------|------------------|
| $T_d(C_1)$ | $24C_1(C_1)$ | $12C_2(C_1)$ | $12C_3(C_1)$ | $8C_4(C_1)$ | $6S_4(C_1)$ | $6D_2(C_1)$ | $6C_{2v}(C_1)$ | $4C_{2v}(C_1)$ | $3D_{2d}(C_1)$ | $2T(C_1)$ | $T_d(C_1)$ |
| $T_d(C_2)$ | $12C_1(C_2)$ | $4C_2(C_2)$ $+4C_3(C_2)$ | $8C_3(C_2)$ | $4C_4(C_2)$ | $2S_4(C_2)$ $+2S_4(C_2)$ | $2D_2(C_2)$ $+D_2(C_2)$ | $2C_{2v}(C_2)$ $+2C_{2v}(C_2)$ | $2C_{2v}(C_2)$ $+2C_{2v}(C_2)$ | $D_{2d}(C_2)$ $+2D_{2d}(C_2)$ | $2T(C_2)$ | $T_d(C_2)$ |
| $T_d(C_3)$ | $12C_1(C_3)$ | $8C_2(C_3)$ $+2C_3(C_3)$ | $5C_3(C_3)$ | $4C_4(C_3)$ | $3S_4(C_3)$ | $3D_2(C_3)$ | $2C_{2v}(C_3)$ $+C_{2v}(C_3)$ | $C_{2v}(C_3)$ $+2C_{2v}(C_3)$ | $D_{2d}(C_3)$ $+D_{2d}(C_3)$ | $T(C_3)$ | $T_d(C_3)$ |
| $T_d(C_4)$ | $8C_1(C_4)$ | $4C_2(C_4)$ | $4C_3(C_4)$ | $2C_4(C_4)$ $+2C_3(C_4)$ | $2S_4(C_4)$ | $2D_2(C_4)$ | $2C_{2v}(C_4)$ | $C_{2v}(C_4)$ $+C_{2v}(C_4)$ | $D_{2d}(C_4)$ | $2T(C_4)$ | $T_d(C_4)$ |
| $T_d(S_4)$ | $8C_1(C_4)$ | $2C_2(C_4)$ $+2C_3(C_4)$ | $3C_3(C_4)$ | $2C_4(C_4)$ | $S_4(C_4)$ $+2S_4(S_4)$ | $D_2(C_4)$ $+D_2(C_4)$ | $C_{2v}(C_4)$ $+C_{2v}(C_4)$ | $C_{2v}(C_4)$ | $D_{2d}(C_4)$ $+D_{2d}(S_4)$ | $T(C_4)$ | $T_d(S_4)$ |
| $T_d(D_2)$ | $6C_1(C_1)$ | $6C_2(C_2)$ | $3C_3(C_1)$ | $2C_4(C_1)$ | $3S_4(C_2)$ | $6D_2(C_2)$ | $3C_{2v}(C_2)$ | $C_{2v}(C_1)$ | $3D_{2d}(D_2)$ | $2T(D_2)$ | $T_d(D_2)$ |
| $T_d(C_{2v})$ | $6C_1(C_1)$ | $2C_2(C_1)$ $+2C_3(C_2)$ | $+3C_3(C_1)$ | $2C_4(C_1)$ | $S_4(C_1)$ $+S_4(C_2)$ | $D_2(C_1)$ $+D_2(C_2)$ | $C_{2v}(C_1)$ $+2C_{2v}(C_{2v})$ | $2C_{2v}(C_2)$ $+C_{2v}(C_{2v})$ | $D_{2d}(C_1)$ $+D_{2d}(C_{2v})$ | $T(C_2)$ | $T_d(C_{2v})$ |
| $T_d(C_{2v})$ | $4C_1(C_1)$ | $2C_2(C_1)$ | $C_3(C_1)$ $+2C_3(C_2)$ | $C_4(C_1)$ $+C_3(C_2)$ | $S_4(C_1)$ $+S_4(C_2)$ | $D_2(C_1)$ $+D_2(C_2)$ | $C_{2v}(C_2)$ $+2C_{2v}(C_{2v})$ | $C_{2v}(C_2)$ $+C_{2v}(C_{2v})$ | $D_{2d}(C_2)$ $+D_{2d}(C_{2v})$ | $T(C_2)$ | $T_d(C_{2v})$ |
| $T_d(D_{2d})$ | $3C_1(C_1)$ | $3C_2(C_2)$ | $C_3(C_1)$ $+C_3(C_2)$ | $C_4(C_1)$ | $S_4(C_2)$ $+S_4(S_4)$ | $3D_2(D_2)$ | $C_{2v}(C_2)$ $+C_{2v}(C_{2v})$ | $C_{2v}(C_2)$ | $D_{2d}(D_2)$ $+D_{2d}(D_{2d})$ | $T(D_2)$ | $T_d(D_{2d})$ |
| $T_d(T)$ | $2C_1(C_1)$ | $2C_2(C_2)$ | $C_3(C_1)$ | $2C_4(C_2)$ | $S_4(C_4)$ | $2D_2(D_2)$ | $C_{2v}(C_2)$ | $C_{2v}(C_2)$ | $D_{2d}(D_2)$ | $2T(T)$ | $T_d(T)$ |
| $T_d(T_d)$ | $C_1(C_1)$ | $C_2(C_2)$ | $C_3(C_2)$ | $C_4(C_2)$ | $S_4(S_4)$ | $D_2(D_2)$ | $C_{2v}(C_{2v})$ | $C_{2v}(C_{2v})$ | $D_{2d}(D_{2d})$ | $T(T)$ | $T_d(T_d)$ |

上記の減縮の過程を図示すれば、第1図のようになる。すなわち Δ (骨格の節点の集合)は、 G の作用によって軌道 Δ 、 α (剰余類表現 $G/(G_1)$ に依存)に分割され、さらに G_1 への減縮によって、 Δ 、 α は副軌道(suborbit):

$$\Delta_{k\beta}^{(i\alpha)} \quad (k=1, 2, \dots, v; \beta=1, 2, \dots, \beta_k) \\ (G/(H_k) \text{に依存する}) \dots (31)$$

に分割される。この分割を、化合物構造の対称性の記号化に用いることが、本発明の骨子である。

明らかに副軌道 $\Delta_{k\beta}^{(i\alpha)}$ の長さ(含まれる節点の数)は、

$$d_{jk} = |\Delta_{k\beta}^{(i\alpha)}| = |G_1| \quad (H_k) \\ = |G_1| / |H_k| \dots (32)$$

で表わされる。これを式(27)に代入すれば、次式を得る。

$$|\Delta_{i\alpha}| = \sum_{k=1}^v \beta_k^{(i\alpha)} |\Delta_{k\beta}^{(i\alpha)}| \\ = \sum_{k=1}^v \beta_k^{(i\alpha)} |G_1| / |H_k|$$

ただし、 $i=1, 2, \dots, s$ および

$$j=1, 2, \dots, s \quad (33)$$

式(17)が成立するので、式(33)は次のように変形できる。

$$|G| / |G_1| = \sum_{k=1}^v \beta_k^{(i\alpha)} |G_1| / |H_k|$$

ただし、 $i=1, 2, \dots, s$ および

$$j=1, 2, \dots, s \quad (34)$$

以下余白

式(18)と式(34)より、次式:

$$\begin{aligned} |\Delta| &= \sum_{j=1}^s \beta_j |\Delta_{j\alpha}| \\ &= \sum_{j=1}^s \beta_j \left(\sum_{k=1}^r \beta_k^{(j)} |G_j| / |H_k| \right) \\ &= \sum_{j=1}^s \left(\sum_{k=1}^r \alpha_k \beta_k^{(j)} \right) |G_j| / |H_k|. \end{aligned}$$

ただし、 $j=1, 2, \dots, s$. (35)

が誘導される。

ここで事例2の場合の記号化について述べる段階に来た。ある骨格(対称性G)の部分群 G_j の化合物を得るためには、式(31)あるいは図1に示した副軌道 $\Delta_{k\beta}^{(i\alpha)}$ を同一の原子(あるいは原子団) $A^{(ijk)}$ で満たす必要がある。この副軌道は式(27)で表わされるCRに支配されている。この副軌道の長さは $r = |G_j| / |H_k|$ であるから、この置換の様式は、

$$G(\backslash G_j) \downarrow G_j [\dots / H_k (A^{(ijk)}) \dots] \quad (36)$$

として、記号化される式(36)で示される記号を、式(10)の右辺の順序でハイフンで連結して構造全体を表わす記号とする。これをSCR記

$$C_{2v}(\backslash C_{2v}) \downarrow C_2 = C_2(\backslash C_2) \quad (38)$$

これらの式は、軌道13($\Delta_2 = (5, 6)$)および軌道14($\Delta_3 = (7)$)に相当している。明らかに、これらは減縮操作によって、単一の副軌道を与える。

以下余白

号とよぶ(Notation by subduction of coset representations).

[実施例8]

化合物(11)の構造の対称性の記号化を、例にとって上記の手順の具体例に示す。第2図に手順を図示する。すでに実施例1において骨格の軌道として式(21)に示すものを得た。骨格の対称性 C_{2v} を C_2 に低下させた。この減縮に伴って、式(21)の第1のCRである、 $C_v(\backslash C_v)$ は第12表(および式(30))に従って分解される。すなわち軌道12($\Delta_1 = (1, 2, 3, 4)$)は副軌道 $\Delta_{11} = (1, 3)$ および $\Delta_{12} = (2, 4)$ に分解される。 Δ_{11} も Δ_{12} も C_2 ($\backslash C_1$)に属する。これらの副軌道12a, 12bに対応している。式(21)の第2および第3のCRは、次式に従って分割される。これらの分割は第12表から容易に求められる。

$$C_{2v}(\backslash C_{2v}) \downarrow C_2 = C_2(\backslash C_1) \quad (37)$$

上記の分割をもとに式(36)に従って、化合物構造(11)の対称性を記号化すると次のようになった。

$$C_{2v}(\backslash C_1) \downarrow C_2[2/C_1(H_2, F_2)] - C_{2v}(C_2') \downarrow C_2[\backslash C_2(C_2)] - C_{2v}(\backslash C_{2v}) \downarrow C_2[\backslash C_2(0)] \quad (39)$$

この記号は、 $C_2(\backslash C_1)$ (2組)で表わされる副軌道を H_2 および F_2 で満たし; $C_2(\backslash C_1)$ で表わされる副軌道を C_2 で満たし;さらに $C_2(\backslash C_2)$ で表わされる副軌道を O で満たしたと解釈される。セミコロン(;)で区切った部分はそれぞれ別の軌道に由来している。

式(39)は、省略SCR記号として

$$C_2[2/C_1(H_2, F_2); \backslash C_1(C_2); \backslash C_2(0)] \quad (40)$$

簡略化することができた。これらは式(39)の[]内の部分を集めて、セミコロンで区切ったものである。式(40)は(39)に比較して、骨格(10)の情報を失っているがなお、他の方法と同様以上の情報を持っている。式(39)および/または式(40)の記号と構造11を番号を介して関係づけたのち、コンピュータに格納

した。

【実施例9】化合物4および5の記号化

第3図を参照しながら、骨格(8)を例にとって、本発明の記号化を説明する。骨格(8)の6個の接点は、実施例に示した通り三つの軌道に分解される。

$$\Delta_1 = (1, 2, 4) \text{ 対応する CR は } D_{3h} \quad (/C_{2v})$$

$$\Delta_2 = (4, 5) \text{ 対応する CR は } D_{3h} \quad (/C_{2v})$$

$$\Delta_3 = (6) \text{ 対応する CR は } D_{3h} \quad (/D_{3h})$$

これらは式(23)に示したものである。

まず C_2 への減縮を行なう。 $C_2 = (1, \sigma_{v(1)})$ であり $\sigma_{v(1)}$ は節点1を含む鏡面による鏡映である。第13表より、各CRの減縮は次の通りである。

$$D_{3h}(/C_{2v}) \downarrow C_2 = C_2(/C_1) + C_2(/C_2) \quad (41)$$

$$D_{3h}(/C_{2v}) \downarrow C_2 = 2C_2(/C_2) \quad (42)$$

および

$$D_{3h}(/D_{3h}) \downarrow C_2 = C_2(/C_2) \quad (43)$$

この分解をもとに、実施例8と同様にして化合物構造4および5の記号化をおこなった。得られた記号は次の通りである。

4については

$$D_{3h}(/C_{2v}) \downarrow C_2 [/C_1(X_2) : /C_2(Z)] = D_{3h}(/C_{2v}) \downarrow C_2 [2/C_2(X,Y)] = D_{3h}(/D_{3h}) \downarrow C_2 [/C_2(P)] \quad (44)$$

5については

$$D_{3h}(/C_{2v}) \downarrow C_2 [/C_1(X_2) : /C_2(Y)] = D_{3h}(/C_{2v}) \downarrow C_2 [2/C_2(X,Z)] = D_{3h}(/D_{3h}) \downarrow C_2 [/C_2(P)] \quad (45)$$

これらの記号はさらに次のように省略できた。

4については

$$C_2 [/C_1(X_2) : /C_2(Z) : 2/C_2(X,Y) : /C_2(P)] \quad (46)$$

5については

$$C_2 [/C_1(X_2) : /C_2(Y) : 2/C_2(X,Z) : /C_2(P)] \quad (47)$$

記号(44)および/または(46)と構造4を番号または符号を介して、結びつけてコンピュータに格納した。同様に記号(45)および/または(47)と構造5を番号または符号を介して結びつけてコンピュータに格納した。

この式に対応する副軌道は第3図に示した通りであった。

以下余白

【実施例10】化合物3の記号化

実施例9と同様にして、化合物3の対称性の記号化を行なった骨格(8)の各軌道を C_2' に減縮した。ただし、 $C_2' = (1, \sigma_h)$ である。 σ_h は節点1, 2, 3を含む鏡面に関する鏡映である。第13表から、次の分解を得た。

$$D_{3h}(/C_{2v}) \downarrow C_2' = 3C_2'(/C_2') \quad (48)$$

$$D_{3h}(/C_{2v}) \downarrow C_2' = C_2'(/C_1) \quad (49)$$

および

$$D_{3h}(/D_{3h}) \downarrow C_2' = C_2'(/C_2') \quad (50)$$

これらの式によって生じる副軌道は、第4図に示した。この副軌道への分解により、化合物3の対称性を記号化した。得られた記号及びその省略形を次に示す。

$$D_{3h}(/C_{2v}) \downarrow C_2' [3/C_2'(X,Y,Z)] = D_{3h}(/C_{2v}) \downarrow C_2' [/C_2'(X_2)] = D_{3h}(/D_{3h}) \downarrow C_2' [/C_2'(P)] \quad (51)$$

省略SCR:

3については

$$C_2' [3/C_2'(X,Y,Z) : /C_2'(X_2) : /C_2'(P)] \quad (52)$$

骨格の誘導体として記号化した)。すなわち $\Delta = (1, 2, \dots, 5)$ に C_{2v} が作用するとする。このとき置換群 $P_{C_{2v}}$ は

$$\begin{aligned} I &: (1)(2)(3)(4)(5) \\ C_2 &: (1\ 2)(3\ 4)(5) \\ \sigma_{v(1)} &: (1)(2)(3\ 4)(5) \end{aligned}$$

および

$$\sigma_{v(2)}: (1\ 2)(3)(4)(5)$$

となる。この取扱によれば $F P V = (5\ 1\ 3\ 3\ 1)$ となるから、これに逆示数表(第3表)を掛けて $M V = (0\ 0\ 1\ 1\ 1)$ を得る。このベクトルは次式に対応する。

$$P_{C_{2v}} = C_{2v}(/G_1) + C_{2v}(/G_2) + C_{2v}(/G_3) \quad (55)$$

この式によって、次の記号を得た。

$$C_{2v}[/G_1(H_2)/G_2(F_2)/C_{2v}(C)] \quad (56)$$

この記号と、化合物2の構造を番号を介して連結して、コンピュータに格納した。容易に分るよ

なること、就中本発明の方法がすぐれていることはすでに述べた通りである。

次に単位減縮巡回指標に(Unit subduced cycle Index:USCI)によって、化合物構造の対称性を記号化し、コンピュータで取り扱う方法を述べる。まず副記号 $\Delta_{\beta k}^{(i\alpha)}$ (式31)の長さは、式(32)で表わされるので、この副軌道に対し、 $S_{\alpha, \beta k}$ なる変数を付与する。この変数を用いて、単位減縮巡回指標(USCI)を次ぎのように定義する。

(定義1)

減縮表現 $G(/G_1) \downarrow G_1$ が式(28)によって分解されるとき、これに対して単位減縮巡回指標(USCI)を次式

$$\begin{aligned} Z(G(/G_1) \downarrow G_1; S) \\ = \prod_{k=1}^v (S_d)_{\beta k}^{(i,j)} \end{aligned} \quad (57)$$

(ただし、 $i=1, 2, \dots, s$ および $j=1, 2, \dots, s$)

うに、この例の記号化は、実施例11における2の記号化を簡略化したものである。(第15表参照。)

ここで、本発明の記号化法による記号と、フレームワーク群によって得られる記号との関連を述べる。次にいくつかの化合物について、両者を列挙する。

1については

$$C_{2v} = [2/G_1(H_2, F_2)/C_{2v}(C)] \text{ 対 } C_{2v}[C_2(C), \sigma_{v(F_2, H_2)}]$$

2については

$$C_{2v}[/G_1(H_2)/G_2(F_2)/C_{2v}(C)] \text{ 対 } C_{2v}[C_2(C), \sigma_{v(F_2)}, \sigma_{v'(H_2)}]$$

9については

$$C_{2v}[/G_1(H_4)/G_2(C_2)/C_{2v}(O)] \text{ 対 } C_{2v}[C_2(O), \sigma_{v(C_2)}, X(H_4)]$$

それぞれの対のうち左側が本発明によるもの、右側がフレームワーク群によるものである。一見して両者が密接に関係していることが分る。しかしながら大部分の化合物において、両者の結果は異

によって定義する。ただし、 $\beta_k^{(i,j)}$ は式(28)でもとめたものである。USCIを各点群Gに対して集めたものをUSCI表という。第16表は C_{2v} のUSCI表である。第17表は D_{3h} 、第18表はTdのそれぞれUSCI表である。これらは第12表～第14表より容易に求めることができる。

以下余白

第 1 6 表

| $I \setminus j$ | $\downarrow C_1$ | $\downarrow C_2$ | $\downarrow C_3$ | $\downarrow C_3'$ | $\downarrow C_{2v}$ |
|---------------------|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|---------------------|
| $C_{2v} (/ C_1)$ | S_1^4 (b_1^4) | S_2^2 (b_2^2) | S_2^2 (C_2^2) | S_2^2 (C_2^2) | S_4 (C_4) |
| $C_{2v} (/ C_2)$ | S_1^2 (b_1^2) | S_1^2 (b_1^2) | S_2 (C_2) | S_2 (C_2) | S_2 (C_2) |
| $C_{2v} (/ C_3)$ | S_1^2 (b_1^2) | S_2 (b_2) | S_1^2 (a_1^2) | S_2 (C_2) | S_2 (a_2) |
| $C_{2v} (/ C_3')$ | S_1^2 (b_1^2) | S_2 (b_2) | S_2 (C_2) | S_1^2 (a_1^2) | S_2 (a_2) |
| $C_{2v} (/ C_{2v})$ | S_1 (b_1) | S_1 (b_1) | S_1 (a_1) | S_1 (a_1) | S_1 (a_1) |
| $\sum m_i^{(j)}$ | 1/4 | 1/4 | 1/4 | 1/4 | 0 |

以下余白

第 1 7 表

| $I \setminus j$ | $\downarrow C_1$ | $\downarrow C_2$ | $\downarrow C_3$ | $\downarrow C_3'$ | $\downarrow C_4$ | $\downarrow C_{2v}$ | $\downarrow C_{2v}$ | $\downarrow C_{2h}$ | $\downarrow D_2$ | $\downarrow D_{2h}$ |
|---------------------|------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|------------------------|------------------------|----------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|--------------------------|
| $D_{2h} (/ C_1)$ | S_1^{12} (b_1^{12}) | S_2^6 (b_2^6) | S_2^6 (C_2^6) | S_1^4 (C_2^4) | S_2^4 (b_2^4) | S_4^2 (C_4^2) | S_4^2 (C_4^2) | S_6^2 (C_6^2) | S_6^2 (C_6^2) | S_{12} (C_{12}) |
| $D_{2h} (/ C_2)$ | S_1^6 (b_1^6) | $S_1^2 S_2^2$ ($b_1^2 b_2^2$) | S_2^6 (C_2^2) | S_2^2 (C_2^2) | S_2^2 (b_2^2) | $S_2 S_4$ ($C_2 C_4$) | S_4 (C_4) | S_6 (C_6) | S_3^2 (b_3^2) | S_6 (C_6) |
| $D_{2h} (/ C_3)$ | S_1^6 (b_1^6) | S_2^2 (b_2^2) | $S_1^2 S_2^2$ ($a_1^2 C_2^2$) | S_2^2 (C_2^2) | S_2^2 (b_2^2) | $S_2 S_4$ ($a_1 C_4$) | S_2^2 (a_2^2) | S_6 (C_6) | S_6 (b_6) | S_6 (a_6) |
| $D_{2h} (/ C_3')$ | S_1^6 (b_1^6) | S_2^2 (b_2^2) | S_2^2 (C_2^2) | S_1^2 (a_1^2) | S_2^2 (b_2^2) | S_2^2 (a_2^2) | S_6 (C_6) | S_3^2 (a_3^2) | S_3^2 (b_3^2) | S_6 (a_6) |
| $D_{2h} (/ C_4)$ | S_1^4 (b_1^4) | S_2^2 (b_2^2) | S_2^2 (C_2^2) | S_2^2 (C_2^2) | S_1^4 (b_1^4) | S_4 (C_4) | S_2^2 (C_2^2) | S_2^2 (C_2^2) | S_2^2 (b_2^2) | S_4 (C_4) |
| $D_{2h} (/ C_{2v})$ | S_1^2 (b_1^2) | $S_1 S_2$ ($b_1 b_2$) | $S_1 S_2$ ($a_1 C_2$) | S_1^2 (a_1^2) | S_2 (b_2) | $S_1 S_2$ ($a_1 a_2$) | S_2 (a_2) | S_2 (a_2) | S_2 (b_2) | S_2 (a_2) |
| $D_{2h} (/ C_{2v})$ | S_1^2 (b_1^2) | S_2 (b_2) | S_1^2 (a_1^2) | S_2 (C_2) | S_1^2 (b_1^2) | S_2 (a_2) | S_1^2 (a_1^2) | S_2 (C_2) | S_2 (b_2) | S_2 (a_2) |
| $D_{2h} (/ C_{2h})$ | S_1^2 (b_1^2) | S_2 (b_2) | S_2 (C_2) | S_1^2 (a_1^2) | S_1^2 (b_1^2) | S_2 (a_2) | S_2 (C_2) | S_1^2 (a_1^2) | S_2 (b_2) | S_2 (a_2) |
| $D_{2h} (/ D_2)$ | S_1^2 (b_1^2) | $S_1 C_2^2$ (b_1^2) | S_2 (C_2) | S_2 (C_2) | S_1^2 (b_1^2) | S_2 (C_2) | S_2 (C_2) | S_2 (C_2) | S_1^2 (b_1^2) | S_2 (C_2) |
| $D_{2h} (/ D_{2h})$ | S_1 (b_1) | S_1 (b_1) | S_1 (a_1) | S_1 (a_1) | S_1 (b_1) | S_1 (a_1) | S_1 (a_1) | S_1 (a_1) | S_1 (b_1) | S_1 (a_1) |
| $\sum m_i^{(j)}$ | 1/12 | 1/4 | 1/4 | 1/12 | 1/6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

第18表

| $i \setminus j$ | $\downarrow C_1$ | $\downarrow C_2$ | $\downarrow C_3$ | $\downarrow C_4$ | $\downarrow C_5$ | $\downarrow C_6$ | $\downarrow C_{2v}$ | $\downarrow C_{3v}$ | $\downarrow D_{2d}$ | $\downarrow T$ | $\downarrow T_d$ |
|--------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|
| $T_d(C_1)$ | s_1^{24} (b_1^{24}) | s_2^{12} (b_2^{12}) | s_3^{12} (c_3^{12}) | s_4^6 (b_4^6) | s_5^6 (c_5^6) | s_6^6 (b_6^6) | s_7^6 (c_7^6) | s_8^6 (c_8^6) | s_9^6 (c_9^6) | s_{12}^6 (b_{12}^6) | s_{24}^6 (c_{24}^6) |
| $T_d(C_2)$ | s_1^{12} (b_1^{12}) | s_2^{24} (b_2^{24}) | s_3^6 (c_3^6) | s_4^6 (b_4^6) | s_5^{24} (c_5^{24}) | s_6^6 (b_6^6) | s_7^{24} (c_7^{24}) | s_8^6 (c_8^6) | s_9^{24} (c_9^{24}) | s_{12}^6 (b_{12}^6) | s_{24}^6 (c_{24}^6) |
| $T_d(C_3)$ | s_1^{12} (b_1^{12}) | s_2^6 (b_2^6) | s_3^{24} (c_3^{24}) | s_4^6 (b_4^6) | s_5^6 (c_5^6) | s_6^{24} (b_6^{24}) | s_7^6 (c_7^6) | s_8^{24} (c_8^{24}) | s_9^6 (c_9^6) | s_{12}^6 (b_{12}^6) | s_{24}^6 (c_{24}^6) |
| $T_d(C_4)$ | s_1^6 (b_1^6) | s_2^6 (b_2^6) | s_3^6 (c_3^6) | s_4^{24} (b_4^{24}) | s_5^6 (c_5^6) | s_6^6 (b_6^6) | s_7^6 (c_7^6) | s_8^6 (c_8^6) | s_9^6 (c_9^6) | s_{12}^6 (b_{12}^6) | s_{24}^6 (c_{24}^6) |
| $T_d(C_5)$ | s_1^6 (b_1^6) | s_2^6 (b_2^6) | s_3^6 (c_3^6) | s_4^6 (b_4^6) | s_5^{24} (c_5^{24}) | s_6^6 (b_6^6) | s_7^{24} (c_7^{24}) | s_8^6 (c_8^6) | s_9^{24} (c_9^{24}) | s_{12}^6 (b_{12}^6) | s_{24}^6 (c_{24}^6) |
| $T_d(C_6)$ | s_1^6 (b_1^6) | s_2^6 (b_2^6) | s_3^6 (c_3^6) | s_4^6 (b_4^6) | s_5^6 (c_5^6) | s_6^{24} (b_6^{24}) | s_7^6 (c_7^6) | s_8^{24} (c_8^{24}) | s_9^6 (c_9^6) | s_{12}^6 (b_{12}^6) | s_{24}^6 (c_{24}^6) |
| $T_d(C_{2v})$ | s_1^6 (b_1^6) | s_2^{12} (b_2^{12}) | s_3^6 (c_3^6) | s_4^6 (b_4^6) | s_5^{12} (c_5^{12}) | s_6^6 (b_6^6) | s_7^{12} (c_7^{12}) | s_8^6 (c_8^6) | s_9^{12} (c_9^{12}) | s_{12}^6 (b_{12}^6) | s_{24}^6 (c_{24}^6) |
| $T_d(C_{3v})$ | s_1^6 (b_1^6) | s_2^6 (b_2^6) | s_3^6 (c_3^6) | s_4^6 (b_4^6) | s_5^6 (c_5^6) | s_6^6 (b_6^6) | s_7^6 (c_7^6) | s_8^6 (c_8^6) | s_9^6 (c_9^6) | s_{12}^6 (b_{12}^6) | s_{24}^6 (c_{24}^6) |
| $T_d(D_{2d})$ | s_1^6 (b_1^6) | s_2^6 (b_2^6) | s_3^6 (c_3^6) | s_4^6 (b_4^6) | s_5^6 (c_5^6) | s_6^6 (b_6^6) | s_7^6 (c_7^6) | s_8^6 (c_8^6) | s_9^6 (c_9^6) | s_{12}^6 (b_{12}^6) | s_{24}^6 (c_{24}^6) |
| $T_d(T)$ | s_1^6 (b_1^6) | s_2^6 (b_2^6) | s_3^6 (c_3^6) | s_4^6 (b_4^6) | s_5^6 (c_5^6) | s_6^6 (b_6^6) | s_7^6 (c_7^6) | s_8^6 (c_8^6) | s_9^6 (c_9^6) | s_{12}^6 (b_{12}^6) | s_{24}^6 (c_{24}^6) |
| $T_d(T_d)$ | s_1 (b_1) | s_2 (b_2) | s_3 (c_3) | s_4 (b_4) | s_5 (c_5) | s_6 (b_6) | s_7 (c_7) | s_8 (c_8) | s_9 (c_9) | s_{12} (b_{12}) | s_{24} (c_{24}) |
| $\Sigma m_i^{(j)}$ | 1/24 | 1/8 | 1/4 | 1/3 | 1/4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

USCIは、アキラル (achiral) な原子または原子団の置換を行なう際の許容される置換様式を示す。例えば第3図から $D_{2h} (/C_{2v}) \downarrow C_2$ は USCI (S_1, S_2) に対応させることができる。第17表においては、このUSCIは $D_{2h} (/C_{2v})$ 行と C_2 列の交点に収録されている。このUSCI (S_1, S_2) は、原子AおよびB (どちらもアキラルとする) が置換する場合にはA, B₂ なるように置換すれば C_2 分子が生ずることを示している。USCI (S_1, S_2) に対応して、軌道指数 [1 2] を使うこともできる。上記の議論を第3図の $D_{2h} (/C_{2v})$ および $D_{2h} (/D_{2h})$ にも適用すれば、 D_{2h} 骨格から生ずる C_2 分子の記号として

$$S_1, S_2; S_1^2; S_1, \dots \dots (58)$$

を得る。化合物4、5には、式(58)で示すUSCIリストによって記号化することができる。先に、化合物4および5は、式(44)および(45)によって区別できることを述べた。今回のUSCIリストは、4と5をひとまとめにし

て記号化することかできる。このように、分子の対称性を、階層化した形で記号化できるのは、本発明の処理方法の大きな利点である。

一般に式(10)により $G (/G_1)$ の多重度が α_1 であるから、次式(59)が G_1 に対応する。

$$\prod_{k=1}^V (\pi(S_{d_{jk}}))^{\alpha_1} \beta_k^{(ij)} \quad (59)$$

これを用いて、一般のUSCIリストは次式で定義される。

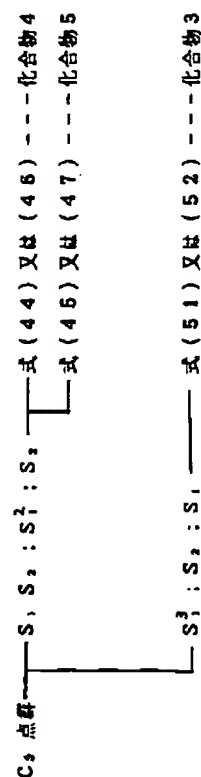
(定義2)

$$\prod_{k=1}^V (\pi(S_{d_{jk}})^{\beta_1} \beta_k^{(1j)}; \pi(S_{d_{jk}})^{\beta_2} \beta_k^{(2j)}; \dots; \pi(S_{d_{jk}})^{\beta_s} \beta_k^{(sj)}) \dots \quad (60)$$

【実施例13】

実施例9および10の結果により、化合物3、4、5の対称性を次のように階層化してコンピュータに格納した。

以下尔白



このように階層化して格納すると、検索などに便利である。

置換する原子および／または原子団として、キラルなものを許容した場合には、USCIリストを拡張して利用する。剰余類表現 G_i ($/H_n$) を次の三種に分類し、それぞれに別種の変数を与える。

(a) G_i および H_n の両方が improper な対称操作を含む場合、変数 a_{ijk} を与える。(アキラル部)；

(b) G_i および H_n の両方が proper な対称操作のみからなる場合、変数 b_{ijk} を与える。(中性部)

(c) G_i が improper で H_n が proper である場合、変数 c_{ijk} を与える。

(キラル部)

これによって、キラル許容性をもった USCI (unit subdivided index with chirability fittingness; 以後 USCI-CF と略す) を次式

(61) で定義する。

(定義3)

$$Z(G_i / G_j) \downarrow G_j : a, b, c) = \prod_{k=1}^V (S_{d_{jk}})^{\beta_k^{(ij)}} \quad (61)$$

式中 S は、アキラル部では、 a 、中性部では、 b 、キラル部では c を示すものとする。USCI-CF をあらかじめ求めて表にしておくことと便利である。第16、17、18表は C_{2v} 、 D_{2h} および T_d の USCI-CF 表である。定義2と同様にして USCI-CF リストを式(62)で定義する。

(定義4)

$$\prod_{k=1}^V (S_{d_{jk}})^{\beta_1^{(1j)}} : \prod_{k=1}^V (S_{d_{jk}})^{\beta_2^{(2j)}} ; \dots ; \prod_{k=1}^V (S_{d_{jk}})^{\beta_s^{(sj)}} \dots \quad (62)$$

第3図のC。の分子を例にとって説明する。このC。分子は次のUSCI-CFリストによって記号化される。

$$a_1 : c_2 : a_1^2 : a_1$$

(63)

このリストのうち $D_{2h}(\text{ノC}_{2v}) \downarrow C_2$ に相当する指数 a_1 、 C_2 は、この部分が AB_2 または AQQ' なる置換様式を許容することを示している。ただし、 Q はキラルな原子団であり Q' はその対掌体である。

この議論を一般化して、次の命題を得る。

(命題2)

アキラル部の軌道(あるいは副軌道)は、アキラルな原子または原子団のみを許容する。中性部の軌道(あるいは副軌道)はキラル、アキラルにかかわらず許容する。キラル部の軌道(あるいは副軌道)はアキラルな原子(団)のみ、あるいはキラルな原子(団)では $QQ' \cdot QQ' \cdots$ なる形の置換のみを許容する。

次にUSCIおよびUSCI-CFを用いた選

(あるいはUSCI-CFリスト)をもつものがないことである。

第5図によって例証しよう。簡単のため $T_2(\text{ノC}_{2v})$ に属する軌道のみを考えよう。すると T_2 部分群のUSCIリストは S_4 であり、上位の T_2 群のリストに一致する。このことは T_2 部分群になるように置換させても、それはすなわち T_2 群になってしまうことを意味する。よって T_2 部分群の分子はこの場合存在しない。ところがキラルな原子(団)まで許容すると、 T_2 のUSCI-CFリスト(b_2)と T_2 のそれ(a_2)とが異なることから、 T_2 分子も存在することがいえる。第5図の中でUSCIリスト(またはUSCI-CFリスト)に○印を付したのは許容される部分群×印を付したのは禁制の部分群である。

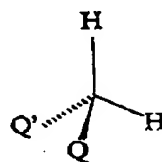
C。分子としては48のほかに、次の49も可能である。このことはUSCIリストおよびUSCI-CFリストから予言されることである。

択則について述べる。ここでは、ある対称Gをもつ骨格がある場合に、各節点を適当な原子あるいは原子団で置換すると、どのような対称が生ずるかを予言することである。

この予言は、コンピュータで分子の対称性に関するデータベースを作成する場合に重要である。たとえば T_2 骨格(7)は、アキラル原子(団)を置換させると、 T_2 、 D_{2d} 、 D_2 、 S_4 、 C_2 、 C_2 のいずれの分子も生じない(第5図)。ところが、キラルな原子(団)まで許すと、生じない対称は D_{2d} および D_2 のみになる。このような許容、禁制を予言する選択則として次の命題がある。

(命題3)

Gの対称性をもつ骨格が式(10)によってCRに分解されたとする。このときこれらのCRの G_1 による縮縮が式(47)のUSCIリスト(あるいは式(49)のUSCI-CFリスト)で表わされたとする。この骨格による G_1 分子の存在は、この上位の群に同じUSCIリスト



49

[実施例14]

実施例9と同様にして41、43、45および48を記号化し、これらの記号をコンピュータに格納した。第19表に結果を示す。

以下余白

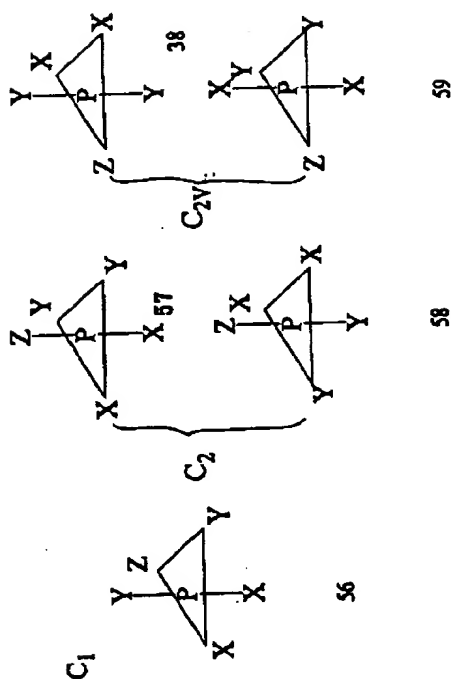
[実施例16]

D_{2h}骨格8について、上記選択則を適用し、第6図を作成した。○印は許容、×印は禁制の部分群である。このうち、56、57、58、59について、実施例9と同様にして記号化を行なった。結果を第20表に示す。

以下余白

第19表

| 分子 | SCT表記法 | 省略SCR表記法 |
|----|---|--------------------------------------|
| 41 | $T_d[C_{2v}(H_2):/T_d(C)]^*$ | $C_{2v}[C_2(A_2):/C_2(H):/C_2(C)]$ |
| 43 | $T_d[C_{2v}] \uparrow C_{2v}[C_2(A_2):/C_2(H)] -$ $T_d(T_d) \uparrow C_{2v}[C_2(C)]$ | $C_{2v}[C_2(B_2):/C_2(A_2):/C_2(C)]$ |
| 45 | $T_d[C_{2v}] \uparrow C_{2v}[C_2(H_2):/C_2(A_2)] -$ $T_d(T_d) \uparrow C_{2v}[C_2(C)]$ | $C_2[C_2(H_2):2/C_2(A_2):/C_2(C)]$ |
| 48 | $T_d[C_{2v}] \uparrow C_2[C_2(H_2):2/C_2(A_2)] -$ $T_d(T_d) \uparrow C_2[C_2(C)]$ | |



第20表

| 分子 | SCR表記法 | 省略SCR表記法 |
|----|---|---|
| 56 | $D_{2h}[C_{2v}] \uparrow C_1[3/C_1(X,Y,Z)] -$ $D_{2h}[C_{2v}] \uparrow C_1[2/C_1(X,Y)] -$ $D_{2h}[D_{2h}] \uparrow C_1[C_1(P)]$ | $C_1[3/C_1(X,Y,Z):$ $2/C_1(X,Y):/C_1(P)]$ |
| 57 | $D_{2h}[C_{2v}] \uparrow C_2[C_2(Y_2):/C_2(X)] -$ $D_{2h}[C_{2v}] \uparrow C_2[2/C_2(X,Z)] -$ $D_{2h}[D_{2h}] \uparrow C_2[C_2(P)]$ | $C_2[C_2(Y_2):/C_2(X):$ $2/C_2(X,Z):/C_2(P)]$ |
| 58 | $D_{2h}[C_{2v}] \uparrow C_2[C_2(X_2):/C_2(Y)] -$ $D_{2h}[C_{2v}] \uparrow C_2[2/C_2(Y,Z)] -$ $D_{2h}[D_{2h}] \uparrow C_2[C_2(P)]$ | $C_2[C_2(X_2):/C_2(Y):$ $2/C_2(Y,Z):/C_2(P)]$ |
| 59 | $D_{2h}[C_{2v}] \uparrow C_{2v}[C_2'(Y_2):/C_{2v}(Z)] -$ $D_{2h}[C_{2v}] \uparrow C_{2v}[C_2(X_2)] -$ $D_{2h}[D_{2h}] \uparrow C_{2v}[C_{2v}(P)]$ | $C_{2v}[C_2'(Y_2):/C_{2v}(Z):$ $/C_2(X_2):/C_{2v}(P)]$ |

USCIは、異性体の数え上げにも有効である。ここで、骨格の節点の集合を Δ とし、これが対称性 G を持つとする。この各節点を置換する原子が $X = \{X_1, X_2, \dots, X_r\}$ の中から選ばれらる。生ずる異性体を、分子式および対称性の観点から数え上げることが目的である。まず、USCIから次の縮小巡回指標を次式(64)で定義する。

(定義5)

$$Z(G_j; S_{d_{jk}}) = \pi \left(S_{d_{jk}} \right)^{\sum_{k=1}^s \alpha_k \beta_k^{(ij)}}$$

ただし $1, 2, 3, \dots, s$

$\dots (64)$

この式は、式(57)のUSCIを i と α に関して受ける事によって求められる。 ρ を、重み W および対称性 G_j をも異性体の数(重複を含む)とする。 ρ は次の命題により求められる。(命題4)

$D_{3n}(\text{---}/C_{3v})$ 行と $D_{3n}(\text{---}/D_{3h})$ 行のUSCIを(64)式に従って乗じて、SC1を作る。これに図形目録として次式を代入する。

$$S_{d_{jk}} = X^{d_{jk}} + Y^{d_{jk}} + Z^{d_{jk}}$$

これによって次の各式をえる。

C_1 については

$$(s_1^3)(s_1^2) = (x+y+z)^3$$

C_2 については

$$(s_1 s_2)(s_2) = (x+y+z)(x^2+y^2+z^2)^2$$

C_3 については

$$(s_1 s_2)(s_1^2) = (x+y+z)^2(x^2+y^2+z^2)$$

C_3' については

$$(s_1^3)(s_2) = (x+y+z)^2(x^2+y^2+z^2)$$

C_3 については

$$(s_2)(s_1^2) = (x+y+z)^2(x^2+y^2+z^2)$$

C_{3v} については

$$(s_1 s_2)(s_2) = (x+y+z)(x^2+y^2+z^2)^2$$

$\rho_{\theta j}$ を与える母関数は次式(65)で表わされる。

$$\sum_{\theta} \rho_{\theta j} W_{\theta} = Z(G_j; S_{d_{jk}}) \quad (65)$$

ただし、

$$S_{d_{jk}} = \sum_{r=1}^{|x|} X_r^{d_{jk}} \quad (66)$$

異性体の数 $A_{\theta i}$ は次式(67)によって求められる。

(命題5)

$$A_{\theta i} = \sum_{j=1}^s \rho_{\theta j} m_i^{(j)} \quad (67)$$

[実施例16]

骨格(8)に X, Y, Z を置換させたときの異性体を数え上げた。 θ は $D_{3h}(\text{---}/C_{3v})$ および $D_{3h}(\text{---}/C_{3v})$ なるCRで記号化される(真ん中の節点は除いて考える)。したがって第13表の

C_{3v} については

$$(s_2)(s_1^2) = (x+y+z)^2(x^2+y^2+z^2)$$

および

C_{3h}, D_3, D_{3h} については

$$(s_2)(s_2) = (x^2+y^2+z^2)(x^2+y^2+z^2)$$

左辺のうち最初の()は $D_{3h}(\text{---}/C_{3v})$ に由来のもの、次の() $D_{3h}(\text{---}/C_{3v})$ に由来のものである。右辺を展開して $W_{\theta} = X^4 Y^2 Z^0$ の係数として $\rho_{\theta j}$ を求める。これを式(67)に代入して $A_{\theta i}$ をもとめる。結果を第21表に示した。

以下余白

第21表

| l | m | n | C_1 | C_2 | C_2' | C_2'' | C_2''' | C_{2v} | C_{2v}' | C_{2v}'' | D_2 | D_{2h} |
|---|---|---|-------|-------|--------|---------|----------|----------|-----------|------------|-------|----------|
| 5 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| 4 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 4 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 3 | 2 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| 3 | 1 | 1 | 0 | 0 | 2 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 3 | 0 | 2 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| 2 | 3 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| 2 | 2 | 1 | 1 | 0 | 2 | 0 | 0 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 2 | 1 | 2 | 1 | 0 | 2 | 0 | 0 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 2 | 0 | 3 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| 1 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 3 | 1 | 0 | 0 | 2 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 2 | 2 | 1 | 0 | 2 | 0 | 0 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 3 | 0 | 0 | 2 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 0 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| 0 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 3 | 2 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| 0 | 2 | 3 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| 0 | 1 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 |

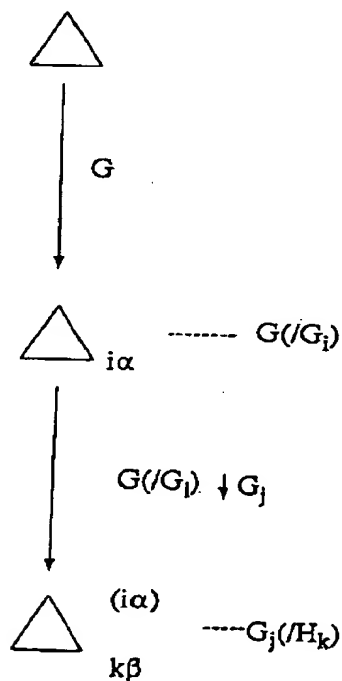
4. 図面の簡単な説明

第1図～第6図は、いずれも本発明の処理方法の例の手順を図示したものである。

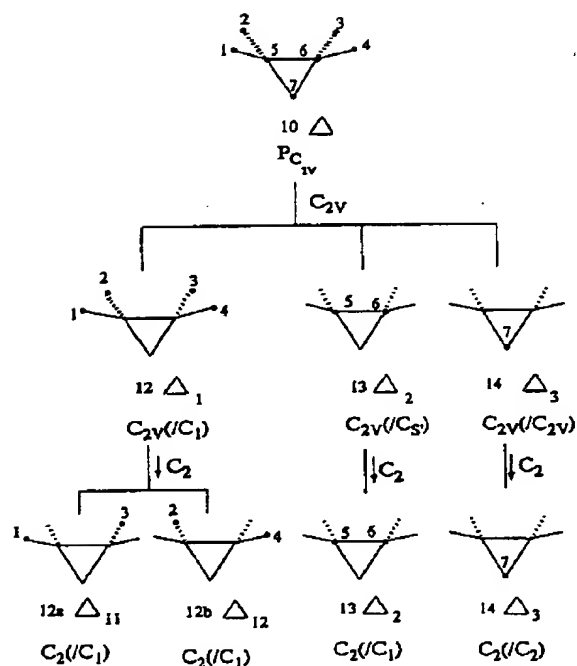
特許出願人 富士写真フイルム株式会社

代理人 弁理士 柳川 泰男

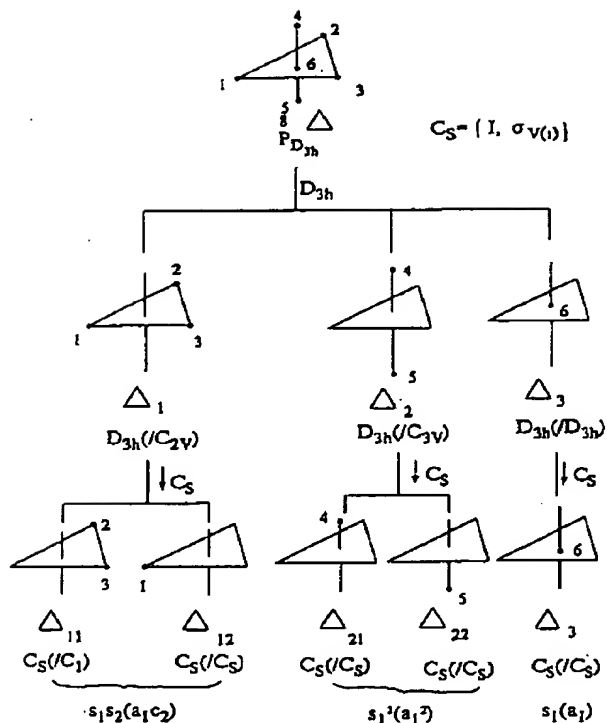
第 1 図



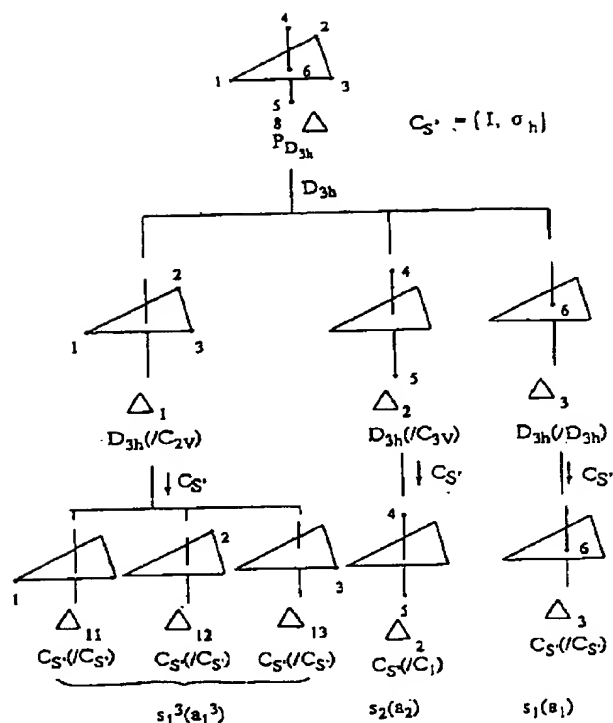
第 2 図



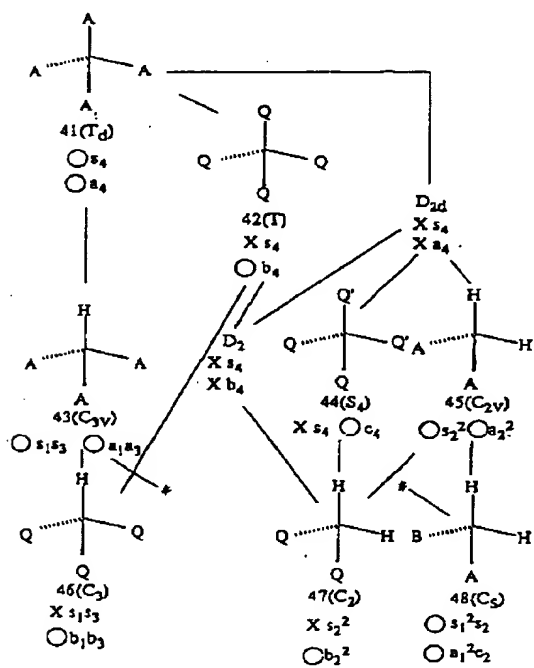
第 3 図



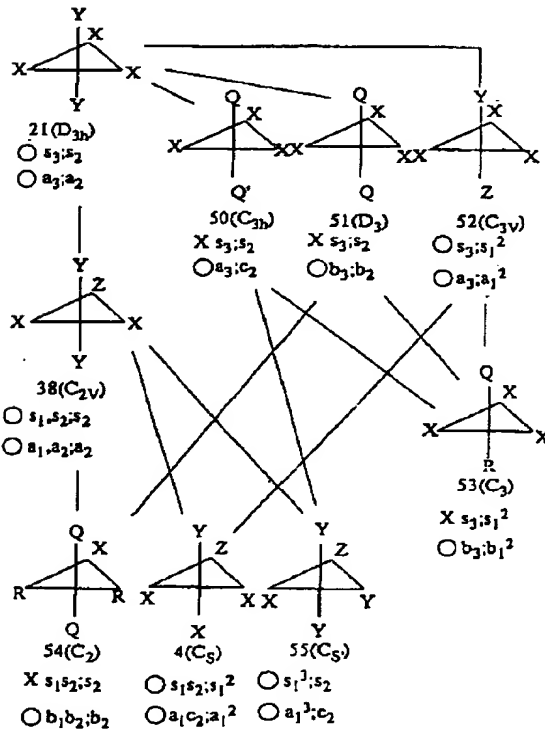
第 4 図



第 5 図



第 6 図



手続補正書 (自発)

第 6 図

平成元年 9月 26日

特許庁長官 殿

1. 事件の表示

平成元年 特許願 第 189982号

2. 発明の名称

化合物の対称性の処理方法

3. 補正をする者

事件との関係

特許出願人

名 称

(520) 富士写真フイルム株式会社

4. 代理人

住 所

東京都新宿区四谷2-14 ミツヤ四谷ビル8階

☎ (358)1788/9

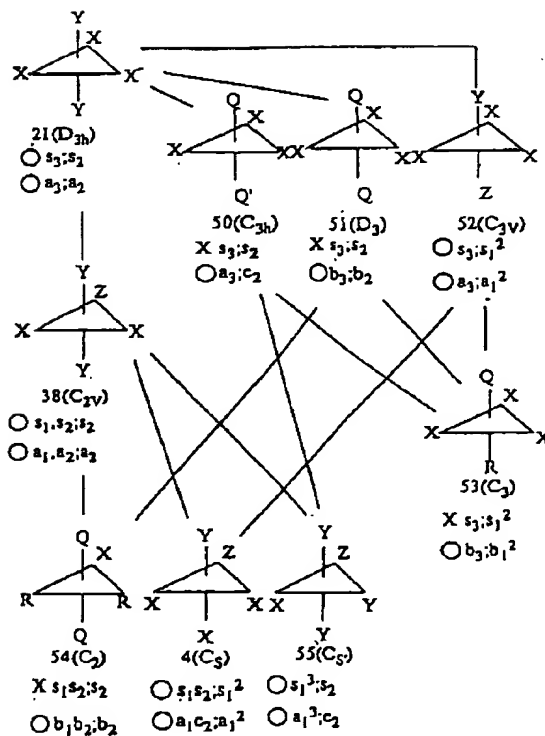
氏 名

(7467) 弁護士 柳 川 泰 男

5. 補正の対象

図面。

6. 補正の内容

出願の願書に添付した図面第6図を
ここに添付の図面第6図と差し替える。

式 登 録

特許庁
1. 9. 27